

岡崎国立共同研究機構

分子科学研究所 要覧 2002

Institute for Molecular Science

巻 頭 言	1
研究所の目的	2
組 織	3
沿 革	4
運 営	6
構 成 員	8
研 究 系	13
研 究 施 設	26
分子スケールナノサイエンスセンター	27
錯体化学実験施設	35
電子計算機室	37
機構共通研究施設	38
技 術 課	42
大型研究設備	43
COEコンファレンス	46
共 同 研 究	48
国際共同研究	49
総合研究大学院大学	50
大学院教育協力	51
国 際 交 流	52
概 要	56
岡崎国立共同研究機構共通施設	58
岡崎国立共同研究機構管理局	60
交 通 案 内	61



表紙図説明

シリコン - 炭素共有結合性ナノインターフェースの構築

特定の場所に特定の分子を埋め込むことにより、新しい分子組織体の構築を目指しています。図は、シリコン表面に有機分子自己組織化膜を成長し、原子間力顕微鏡で局所的に加工したものです（作製：総研大・荒 正人）。字の線幅は約30 nmです。加工した場所には、色素やタンパクなど他の分子を結合させることができます。

巻頭言



法人化問題を間近に控え、大学共同利用機関が、我が国の学術研究体制で果たすべき役割はますます重くなっている。研究所としての自律性を保持しつつ、今後の分野を超えた学術研究の連携体制を構築することが今問われている重要な課題である。

平成12年度に発足した統合バイオサイエンスセンターの新しい研究棟がE地区の新しいキャンパスに完成し、3研究所の研究協力がいよいよ実施段階となった。また、この1-2年の間に、E地区に本年度から発足する分子スケールナノサイエンスセンターの研究棟、関連科学研究系および錯体化学実験施設の研究棟の建築が予定され、統合バイオサイエンスセンターと協力しつつ、原子レベルから生命体までの新しい物質観を創製する場ができあがりつつある。極端紫外光実験施設の高度化計画が今年度実施され、分子科学専用の放射光として益々共同利用研究の成果が期待される。

例年のことではあるが、本年度も多くの方々が生体分子科学研究所から転出され、同時に多くのの方々を分子科学研究所に迎えた。関連領域研究系の渡辺芳人教授は名古屋大学理学研究科物質理学専攻の教授として転出された。極端紫外光実験施設の鎌田雅夫助教授は佐賀大学理工学部にて教授として転出され、新しい放射光施設建設の指揮をとられている。極端紫外光科学研究系の田原太平助教授は一年の併任の後、理化学研究所の主任研究員として転任された。関連領域研究系分子クラスター研究部門の笠井俊夫教授および高須昌子助教授は2年間の流動部門での研究生活を終え、大阪大学および金沢大学へ復帰された。両先生の分子科学研究所への多大な貢献を篤く感謝する。共通研究施設である計算科学研究センターの青柳睦助教授は九州大学情報基盤センター教授として転出されたが、引き続き分子科学研究所の理論研究系の教授を併任され、本研究所の理論化学の推進に御尽力いただく。分子構造研究系分子動力学研究部門の併任をされていた北川禎三教授は統合バイオサイエンスセンター教授としてE地区の新棟に研究室が移転し、統合バイオサイエンスセンターでの研究協力体制の要として活躍されることになり、分子動力学研究部門の後任として東京大学から横山利彦教授が転任された。計算科学研究センターは東京工業大学から岡崎進教授を、極端紫外光実験施設には神戸大学から木村真一助教授を迎えた。また、分子クラスター研究部門には広島大学から谷本能文教授、静岡大学から石田俊正助教授らが流動部門教官として着任され、これからの2年間の充実した研究が期待されている。

平成13年度日本化学会賞を北川禎三教授が、同進歩賞を理論研究系の佐藤啓文助手が受賞された。両氏の今後のますますの学問的発展を期待し、お祝いの言葉に代えさせていただきたい。

平成14年5月

茅 幸 二

研究所の目的

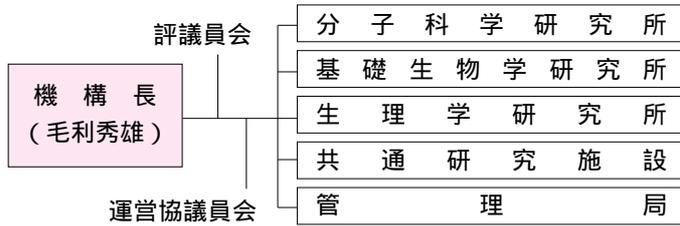
分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界にある分子科学の研究を推進するための中核として、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関である。物質観の基礎を培う研究機関として広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図している。

限られた資源のなかで、生産と消費の上に成り立つ物質文明が健全に保持されるためには、諸物質の機能を深く理解し、その正しい利用を図るのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければならない。分子科学研究所が対象とする分子の形成と変化に関する原理、分子と光との相互作用、分子を通じて行われるエネルギー変換の機構等に関する研究は、いずれも物質循環の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものである。

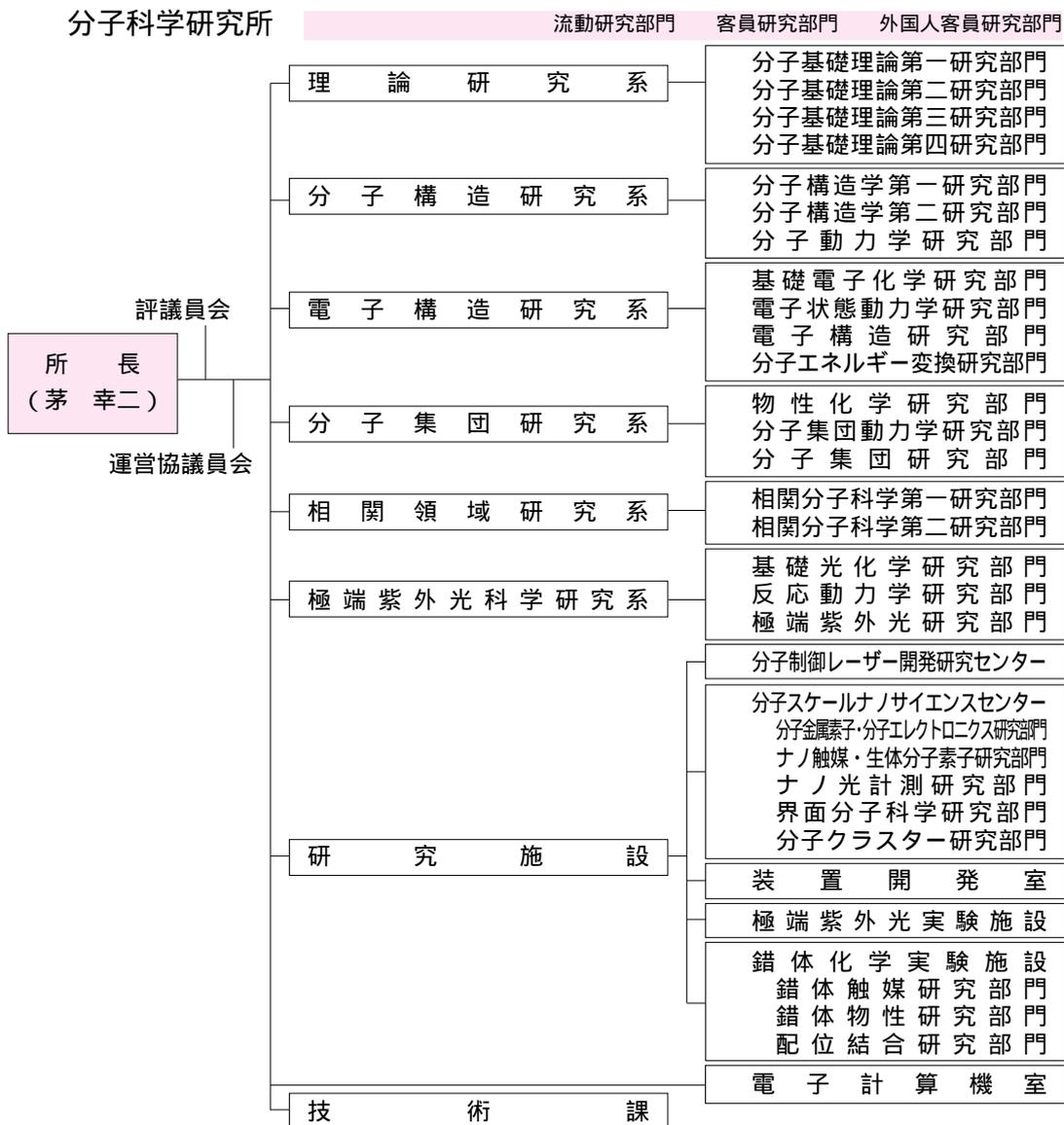


組織

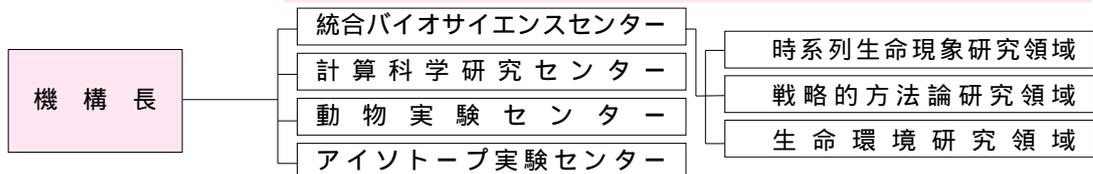
岡崎国立共同研究機構



分子科学研究所



共通研究施設



組
織

沿革

昭和36年頃から分子科学研究者の間に研究所設立の要望が高まり、社団法人日本化学会の化学研究将来計画委員会においてその検討が進められた。昭和40年に至り、日本学術会議から「分子科学研究所」（仮称）の設置について内閣総理大臣に対し勧告がなされた。この結果、化学研究連絡委員会に分子科学研究所小委員会が設けられ、研究所設立の推進に当たることとなった。

これと並行して、研究者の間に研究会が組織され、科学研究費補助金（特定研究「分子科学」）の交付を受け、昭和46年度と47年度の2年間にわたり、分子科学に関する研究を行い、分子科学全般の基礎となる研究方法を開発するとともに、研究所発足に際して施設・設備の円滑な整備を図ることが検討された。昭和48年10月、学術審議会会長から文部大臣に対し、分子科学研究所を緊急に設立することが適当であるとの報告がなされた。

次いで、昭和49年度予算において創設準備経費が計上され、同年4月10日、文部大臣裁定により分子科学研究所創設準備室（定員3名）及び分子科学研究所設立準備会議が設置された。

昭和50年	4月	分子科学研究所創設（昭和50年4月22日） 分子構造研究系（分子構造学第一研究部門，分子構造学第二研究部門） 電子構造研究系（基礎電子化学研究部門） 分子集団研究系（物性化学研究部門，分子集団研究部門） 機器センター 装置開発室 管理部（庶務課，会計課，施設課，技術課）
昭和51年	5月	理論研究系（分子基礎理論第一研究部門，分子基礎理論第二研究部門） 関連領域研究系（関連分子科学研究部門） 化学試料室
昭和52年	4月	関連領域研究系関連分子科学研究部門廃止 関連領域研究系（関連分子科学第一研究部門，関連分子科学第二研究部門） 電子計算機センター 極低温センター
	5月	管理部が管理局となり，分子科学研究所と創設された生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）の事務を併せ処理。 管理局（庶務課，人事課，主計課，経理課，建築課，設備課，技術課）改組
昭和53年	4月	電子構造研究系（電子状態動力学研究部門，電子構造研究部門） 分子集団研究系（基礎光化学研究部門）
昭和54年	4月	分子構造研究系（分子動力学研究部門） 管理局改組 総務部（庶務課，人事課，国際研究協力課）， 経理部（主計課，経理課，建築課，設備課）， 技術課
昭和56年	4月	岡崎国立共同研究機構創設 昭和56年4月14日，分子科学研究所及び生物科学総合研究機構（基礎生物学研究所，生理学研究所）は総合化され，3研究所は岡崎国立共同研究機構として一体的に運営。 管理局が岡崎国立共同研究機構管理局に，技術課が研究所所属。 理論研究系（分子基礎理論第三研究部門）
昭和57年	4月	極端紫外光実験施設

昭和58年	4月	電子構造研究系（分子エネルギー変換研究部門） 分子集団研究系（分子集団動力学研究部門，極端紫外光研究部門）
昭和59年	4月	錯体化学実験施設（錯体合成研究部門，錯体触媒研究部門）
昭和61年	4月	錯体化学実験施設（配位結合研究部門）
昭和63年	10月	総合研究大学院大学創設 分子科学研究所に（数物科学研究科構造分子科学専攻，機能分子科学専攻）設置
平成元年	5月	分子集団研究系（界面分子科学研究部門） 相関領域研究系（有機構造活性研究部門） 錯体化学実験施設（錯体物性研究部門）
平成3年	4月	分子集団研究系（物性化学研究部門，分子集団動力学研究部門，分子集団研究部門） 極端紫外光科学研究系（基礎光化学研究部門，反応動力学研究部門，界面分子科学研究部門，極端紫外光研究部門）
平成7年	4月	相関領域研究系有機構造活性研究部門廃止 理論研究系（分子基礎理論第四研究部門）
平成8年	5月	相関領域研究系（分子クラスター研究部門） 管理局 総務部（庶務課，人事課，研究協力課，国際交流課）改組
平成9年	4月	極低温センター，機器センター及び化学試料室廃止 分子制御レーザー開発研究センター 分子物質開発研究センター
平成12年	4月	電子計算機センター，錯体化学実験施設錯体合成研究部門廃止 電子計算機室 機構共通研究施設（統合バイオサイエンスセンター， 計算科学研究センター，動物実験センター，アイソトープ実験センター）
平成14年	4月	相関領域（分子クラスター研究部門），極端紫外光科学研究系（界面分子科学研究部門），分子物質開発研究センター廃止 分子スケールナノサイエンスセンター（分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門，ナノ触媒・生命分子素子研究部門，ナノ光計測研究部門，界面分子科学研究部門，分子クラスター研究部門）

ゴシック体は設置または改組を示す。

施設の整備状況

建設年次	施設名
昭和51年度	エネルギーセンター（期），実験棟（期），生活排水処理施設，実験廃液処理施設
昭和52年度	研究棟，装置開発室，機器センター，化学試料室
昭和53年度	管理棟，図書館，実験棟（期），電子計算機センター，極低温センター
昭和54年度	環境整備，エネルギーセンター（期）
昭和55年度	職員会館（期），共同利用研究者宿泊施設
昭和57年度	極端紫外光実験棟（期），極端紫外光実験棟（期），エネルギーセンター（期）
昭和58年度	共同利用研究者宿泊施設
昭和59年度	職員会館（期），環境整備
昭和61年度	共同利用研究者宿泊施設
昭和63年度	南実験棟
平成2年度	極端紫外光実験研究棟（増築）
平成5年度	電子計算機センター棟（増築）
平成8年度	岡崎コンファレンスセンター

運営

評議員会

研究所の事業計画その他の管理運営に関する重要事項について所長に助言する。

評議員

会長 副会長

蟻川 芳子	日本女子大学理学部教授
飯吉 厚夫	中部大学長
石谷 炯	(財)神奈川科学技術アカデミー専務理事
大塚 榮子	(独)産業技術総合研究所フェロー
荻野 博	放送大学宮城学習センター所長、東北大学名誉教授
海部 宣男	国立天文台長
木村 嘉孝	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所長
京極 好正	(独)産業技術総合研究所生物情報解析研究センター長
後藤 圭司	前豊橋技術科学大学長
近藤 保	豊田工業大学客員教授
佐原 眞	前国立歴史民俗博物館長
高橋 理一	(株)豊田中央研究所代表取締役所長
土屋 莊次	早稲田大学理工学総合研究センター客員教授
廣田 襄	京都大学名誉教授
福山 秀敏	東京大学物性研究所長
細矢 治夫	お茶の水女子大学名誉教授
山崎 敏光	理化学研究所 R I ビーム科学研究室研究協力員
山村庄 亮	慶應義塾大学名誉教授
BRADSHAW, Alexander M.	独国マックスプランク・プラズマ物理学研究所長
LINBERGER, William Carl	米国コロラド大学教授

運営協議員会

共同研究計画に関する事項その他の研究所の運営に関する重要事項で、所長が必要と認めるものについて所長の諮問に応じる。

運営協議員

会長 副会長

阿久津 秀雄	大阪大学たんぱく質研究所教授	魚住 泰広	錯体化学実験施設教授
阿知波 洋次	東京都立大学大学院理学研究科教授	宇理須 恆雄	極端紫外光科学研究系教授
宇田川 康夫	東北大学多元物質科学研究所教授	北川 禎三	統合バイオサイエンスセンター教授
太田 信廣	北海道大学電子科学研究所教授	小杉 信博	極端紫外光科学研究系教授
川合 眞紀	理化学研究所表面化学研究室主任研究員	小林 速男	分子集団研究系教授
北原 和夫	国際基督教大学教養学部教授	田中 晃二	錯体化学実験施設教授
榊 茂好	京都大学大学院工学研究科教授	中村 宏樹	理論研究系教授
菅原 正	東京大学大学院総合文化研究科教授	西 信之	電子構造研究系教授
濱口 宏夫	東京大学大学院理学系研究科教授	平田 文男	理論研究系教授
西川 恵子	千葉大学大学院自然科学研究科教授	藤井 正明	電子構造研究系教授
		薬師 久彌	分子集団研究系教授

運営協議員会に、次の人事選考部会及び共同研究専門委員会を置く。

人事選考部会

教官候補者の選考に関する事項の調査審議

宇田川 康 夫（東北大教授）
太 田 信 廣（北大教授）
榊 茂 好（京大教授）
濱 口 宏 夫（東大院教授）
阿知波 洋 次（東京都大教授）
小 杉 信 博（分子研教授）
中 村 宏 樹（分子研教授）
平 田 文 男（分子研教授）
藤 井 正 明（分子研教授）
薬 師 久 彌（分子研教授）

共同研究専門委員会

共同研究計画に関する事項等の調査

伊 藤 翼（東北大院教授）
川 合 真 紀（理化研主任研究員）
菅 原 正（東大院教授）
富 宅 喜代一（神戸大教授）
宇理須 恆 雄（分子研教授）
小 林 速 男（分子研教授）
田 中 晃 二（分子研教授）
谷 本 能 文（分子研教授）
西 信 之（分子研教授）
谷 村 吉 隆（分子研助教授）
中 村 敏 和（分子研助教授）
見 附 孝一郎（分子研助教授）

共同利用機関としての機能を果たすため次の会議を設け、所長を補佐する。

学会等連絡会議

所長の要請に基づき学会その他の学術団体等の連絡、共同研究専門委員会委員候補者等の推薦等に関する事について、検討し、意見を述べる。

市 川 行 和（宇宙研名誉教授）
榎 敏 明（東工大院教授）
太 田 信 廣（北大教授）
小 林 昭 子（東大院教授）
高 塚 和 夫（東大院教授）
張 紀久夫（阪大院教授）
寺 嶋 正 秀（京大院教授）
富 岡 秀 雄（三重大教授）
永 田 敬（東大院教授）
西 川 恵 子（千葉大院教授）
平 尾 公 彦（東大院教授）
平 岡 賢 三（山形大教授）
山 内 薫（東大院教授）
山 下 晃 一（東大院教授）
北 川 禎 三（分子研教授）
小 林 速 男（分子研教授）
西 信 之（分子研教授）
平 田 文 男（分子研教授）
見 附 孝一郎（分子研助教授）

教授会議

専任・併任の教授・助教授で構成し、研究及び運営に関する事項について調査審議する。

構 成 員

茅 幸 二 所 長

長 倉 三 郎 研究顧問, 名誉教授
 井 口 洋 夫 研究顧問, 名誉教授
 土 屋 莊 次 研究顧問
 伊 藤 光 男 研究顧問, 名誉教授
 廣 田 襄 研究顧問
 近 藤 保 研究顧問
 廣 田 榮 治 名誉教授
 木 村 克 美 名誉教授
 諸 熊 奎 治 名誉教授
 丸 山 有 成 名誉教授
 吉 原 經 太 郎 名誉教授
 花 崎 一 郎 名誉教授
 岩 村 秀 名誉教授
 齋 藤 修 二 名誉教授
 岩 田 末 廣 名誉教授

理論研究系

研究主幹(併) 中 村 宏 樹

分子基礎理論第一研究部門

永 瀬 茂 教授
 岡 本 祐 幸 助教授
 小 林 郁 助手
 崔 隆 基 非常勤研究員
 依 田 隆 夫 リサーチ・アソシエイト
 山 崎 健 リサーチ・アソシエイト
 LU, Jing 学振外国人特別研究員
 13.9.14 ~ 15.9.13
 李 秀 栄 学振特別研究員
 野 口 博 司 学振特別研究員
 高 木 望 学振特別研究員
 SLANINA, Zdenek 学振外国人招へい研究者(長期)
 14.11.28 ~ 15.9.28

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹 教授
 谷 村 吉 隆 助教授
 朱 超 原 助手
 高 見 利 也 助手
 鈴 木 陽 子 助手
 加 藤 毅 非常勤研究員
 藤 崎 弘 士 非常勤研究員
 KONDORSKIY, Alexey 学振外国人特別研究員
 13.11.15 ~ 15.11.14
 Mil'nikov, Gennady V. 特別協力研究員

分子基礎理論第三研究部門(客員研究部門)

平 尾 公 彦 教授(東大院工)
 高 柳 敏 幸 助教授(日本原子力研究所)
 KOVALENKO, Andriy F. 助手

分子基礎理論第四研究部門

平 田 文 男 教授
 米 満 賢 治 助教授
 岸 根 順 一 郎 助手
 大 塚 雄 一 非常勤研究員
 LUTY, Tadeusz Michal 文部科学省外国人研究員
 14.5.18 ~ 14.8.17

分子構造研究系 研究主幹(併) 北川 禎 三

分子構造学第一研究部門

岡本 裕 巳 教授
 森田 紀 夫 助教授
 井村 考 平 助手
 永原 哲 彦 非常勤研究員

分子動力学研究部門

北川 禎 三 教授(総合イノベーションセンター)
 横山 利 彦 教授
 加藤 立 久 助教授
 内田 毅 助手
 古川 貢 助手
 外山 南美樹 非常勤研究員
 松岡 秀 人 学振特別研究員
 PAL, Biswajit 学振外国人特別研究員
 13.11.15 ~ 15.11.14

分子構造学第二研究部門(客員研究部門)

阿久津 秀 雄 教授(阪大たんぱく研)
 和田 昭 英 助教授(東工大資源化学)

電子構造研究系 研究主幹(併) 西 信 之

基礎電子化学研究部門

西 信 之 教授
 中林 孝 和 助手
 根岸 雄 一 助手
 今井 宏 之 リサーチ・アソシエイト
 PROKOP, Petra リサーチ・アソシエイト
 小杉 健太郎 リサーチ・アソシエイト
 池田 真 吾 研究員(科学研究)
 森 道 康 研究員(科学研究)
 岩瀬 裕 希 研究員(科学研究)
 大下 慶次郎 学振特別研究員

DELANGE, Cornelis A. 学振外国人招へい研究者(短期)
 14.9.1 ~ 14.9.20
 渡邊 武 史 学振特別研究員
 松本 剛 昭 学振特別研究員

電子構造研究部門(客員研究部門)

飯島 澄 男 教授(NECラボラトリーズ)
 三沢 和 彦 助教授(東京農工大工)
 井口 佳 哉 助手

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員研究部門)

CARRAVETTA, Vincenzo 教授
 (国立量子化学・分子エネルギー学研究所 上級研究員)
 14.2.11 ~ 14.8.10
 BARANOV, Nikolai Viktorovich 助教授
 (ウラル州立大学 教授)
 14.4.1 ~ 14.6.30
 KOZLOWSKI, Pawel M. 助教授
 (ルイスビル大学 助教授)
 14.7.1 ~ 14.12.31
 SOLOVJEV, Evgeni 教授
 (マケドニア科学アカデミー 教授)
 14.9.1 ~ 15.6.30

電子状態動力学研究部門

藤井 正 明 教授
 鈴木 俊 法 助教授
 高口 博 志 助手
 酒井 誠 助手
 西出 龍 弘 研究員(科学研究)
 KIM, Sang-Kyu 文部科学省外国人研究員
 14.7.1 ~ 14.8.31
 14.12.26 ~ 15.2.25

分子集団研究系 研究主幹(併) 小林 速 男

物性化学研究部門

薬師 久 彌 教授
 中村 敏 和 助教授
 山本 薫 助手
 藤山 茂 樹 助手
 山本 貴 非常勤研究員
 WOJCIECHOWSKI, Roman P. 学振外国人特別研究員
 13.9.28 ~ 14.9.27
 中野 千賀子 特別協力研究員
 DROZDOVA, Olga 特別協力研究員

分子集団動力学研究部門

小林 速 男 教授
 藤原 秀 紀 助手
 山田 亮 助手
 WANG, Zhe-Ming 文部科学省外国人研究員
 14.7.21 ~ 15.7.20
 LEE, Ha-Jin 学振外国人特別研究員
 14.6.15 ~ 16.6.14
 大塚 岳 夫 学振特別研究員
 ZHANG, Bin 文部科学省外国人研究員
 13.6.2 ~ 14.5.31

分子集団研究部門(客員研究部門)

加藤 礼 三 教授(理研)
 小川 琢 治 助教授(愛媛大理)

相 関 領 域 研 究 系 研究主幹 (併) 魚 住 泰 広

相 関 分 子 科 学 第 一 研 究 部 門

木 下 一 彦 教 授 (統 合 バイオインセンター)
 青 野 重 利 教 授 (統 合 バイオインセンター)
 井 上 克 也 助 教 授
 細 越 裕 子 助 手

相 関 分 子 科 学 第 二 研 究 部 門 (客 員 研 究 部 門)

粟 津 浩 一 教 授
 (新 エネルギー産業技術総合開発機構)
 菊 地 耕 一 助 教 授 (東 京 都 立 大 院 理)

極 端 紫 外 光 科 学 研 究 系 研究主幹 (併) 宇 理 須 恆 雄

基 礎 光 化 学 研 究 部 門

小 杉 信 博 教 授
 初 井 宇 記 助 手
 陰 地 宏 非 常 勤 研 究 員
 永 園 充 研 究 員 (科 学 研 究)
 MANDAL, Debabrata 学 振 外 国 人 特 別 研 究 員
 12.11.27 ~ 14.11.26

MORÉ, Sam Dyran 非 常 勤 研 究 員
 WANG, Changshun 特 別 協 力 研 究 員

極 端 紫 外 光 研 究 部 門 (外 国 人 客 員 研 究 部 門)

GU, Ning 教 授
 (東 南 大 学 教 授, ナノスケール科学技術研究センター長)
 14.1.29 ~ 14.7.28
 BERG, Bernd A. 助 教 授
 (フ ロリダ 州 立 大 学 教 授)
 14.4.1 ~ 14.6.30
 GANGAVARAPU, Ranga Rao 助 教 授
 (イ ン ド 工 業 大 学 マ ド ラ ス 校 助 教 授)
 14.8.1 ~ 15.7.31
 DINSE, Klaus Peter 教 授
 (ド ル ト ム ン ト 大 学 教 授)
 14.8.1 ~ 14.10.31

反 応 動 力 学 研 究 部 門

宇 理 須 恆 雄 教 授
 見 附 孝 一 郎 助 教 授
 水 谷 雅 一 助 手
 野 々 垣 陽 一 助 手
 江 潤 卿 非 常 勤 研 究 員
 森 崇 徳 研 究 員 (科 学 研 究)

分 子 制 御 レーザー開発研究センター センター長 (併) 藤 井 正 明

分 子 位 相 制 御 レーザー開発研究部

放 射 光 同 期 レーザー開発研究部

猿 倉 信 彦 助 教 授
 大 竹 秀 幸 助 手
 村 上 英 利 非 常 勤 研 究 員

特 殊 波 長 レーザー開発研究部

平 等 拓 範 助 教 授
 庄 司 一 郎 助 手
 PAVEL, Nicolaie 学 振 外 国 人 招 へ い 研 究 者 (長 期)
 14.4.1 ~ 15.1.31

分 子 スケールナノサイエンスセンター センター長事務取扱 (併) 茅 幸 二

分 子 金 属 素 子・分 子 エレクトロニクス研究部門

畠 田 博 一 助 教 授
 鈴 木 敏 泰 助 教 授
 田 中 彰 治 助 手
 阪 元 洋 一 助 手
 白 沢 信 彦 非 常 勤 研 究 員
 藤 原 栄 一 研 究 員 (科 学 研 究)

界 面 分 子 科 学 研 究 部 門 (流 動 研 究 部 門)

小 宮 山 政 晴 教 授
 奥 平 幸 司 助 教 授
 高 嶋 圭 史 助 手
 久 保 園 芳 博 助 手
 松 本 太 輝 非 常 勤 研 究 員
 李 艶 君 特 別 協 力 研 究 員
 吉 村 大 介 特 別 協 力 研 究 員

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

永 田 央 助 教 授
 藤 井 浩 助 教 授 (統 合 バイオインセンター)
 細 川 洋 一 非 常 勤 研 究 員

分 子 クラスタ研究部門 (流 動 研 究 部 門)

谷 本 能 文 教 授
 石 田 俊 正 助 教 授
 藤 原 昌 夫 助 手
 大 庭 亨 助 手

ナノ光計測研究部門

佃 達 哉 助 教 授
 村 山 美 乃 研 究 員 (科 学 研 究)

装置開発室 室長(併) 薬師久彌

渡邊三千雄 助教授

極端紫外光実験施設 施設長(併) 小杉信博

木村真一	助教授	保坂将人	助手
繁政英治	助教授	下條竜夫	助手
加藤政博	助教授	持箸晃	助手
堀洋一郎	助教授(客員) (高工ネ物質構造科学研)	高橋和敏	助手

錯体化学実験施設 施設長(併) 田中晃二

錯体触媒研究部門

魚住泰広 教授
 山下正廣 教授(客員)
 (東京都立大院理)
 茶谷直人 助教授(客員)
 (阪大院工)
 山野井慶徳 助手
 竹中和浩 非常勤研究員
 柴富一孝 非常勤研究員(委)
 RHEE, Hak-June 文部科学省外国人研究員
 14.4.3 ~ 14.7.31
 HOCKE, Heiko 学振外国人特別研究員
 12.9.1 ~ 14.8.31
 小林幸業 民間等共同研究員

錯体物性研究部門

田中晃二 教授
 川口博之 助教授
 和田亨 助手
 松尾司 助手
 結城雅弘 非常勤研究員
 安江崇裕 研究員(科学技術振興調整)
 相原秀典 研究員(科学技術振興調整)

配位結合研究部門(客員研究部門)

時任宣博 教授(京大化研)
 鬼塚清孝 助教授(阪大産業科学研)

電子計算機室 室長(併) 平田文男

岡崎進	教授(計算科学研究センター)	南部伸孝	助手(計算科学研究センター)
青柳睦	教授(併)	大野人侍	助手(計算科学研究センター)

機構共通研究施設(分子科学研究所関連)

統合バイオサイエンスセンター

戦略的方法論研究領域

青野重利 教授
 木下一彦 教授
 藤井浩 助教授

生命環境研究領域

北川禎三 教授
 倭剛久 助教授(客員)
 (名大院理)
 平松弘嗣 非常勤研究員
 太田雄大 学振特別研究員
 長野恭朋 学振特別研究員

計算科学研究センター センター長(併) 平田文男

岡崎進	教授	大野人侍	助手
青柳睦	教授(併)	眞木淳	非常勤研究員
南部伸孝	助手		

技術課

課長 酒井 楠 雄

第1技術班 班長 松戸 修

理論研究系技術係

技官 石村 和也

分子構造研究系技術係

技官 林 直毅

技官 長友 重紀

電子構造研究系技術係

係長 中村 永研

技官 片柳 英樹

第2技術班 班長 西本 史雄

分子集団研究系技術係

係長 吉田 久史

技官 賣市 幹大

技官 大石 修

技官 岡野 芳則

相關領域研究系技術係

極端紫外光科学研究系技術係

係長 水谷 伸雄

第3技術班

電子計算機技術係

係長 水谷 文保

技官 手島 史綱

技官 南野 智

技官 内藤 茂樹

装置開発技術係

係長 鈴井 光一

技官 内山 功一

技官 豊田 朋範

技官 松下 幸司

技官 矢野 隆行

第4技術班 班長 山中 孝弥

分子制御レーザー開発技術係

係長 山崎 潤一郎

技官 上田 正

極端紫外光実験技術係

係長 蓮本 正美

技官 林 憲志

技官 近藤 直範

第5技術班 班長 加藤 清則

分子スケールナノサイエンス技術第一係

係長 永田 正明

技官 戸村 正章

技官 牧田 誠二

分子スケールナノサイエンス技術第二係

係長 高山 敬史

主任 酒井 雅弘

錯体化学実験技術係

技官 水川 哲徳

* 構成員は平成14年5月1日現在。ただし、外国人研究者で平成14年度中に3か月を超えて滞在することが予定されている者は掲載した。

研究系

理論研究系

分子科学は、量子力学・統計力学を中心とする理論の進歩に基づいて発展した。本研究系では、分子科学の基礎としての理論研究を遂行するとともに、所内外の実験研究者と密接に連携して、実験結果の解釈、新しい指針の提供をも行っている。理論計算には計算科学研究センターの大型計算機を使用し、同センターとはプログラム開発や数値計算に関して密接に協力しあっている。

分子基礎理論第一研究部門

1. 分子の設計と反応の理論と計算

分子科学の限りない夢は、分子を電子レベルで統一的に理解し、「望む構造、物性、機能を自由にデザインして組み立てて思うがままに反応させる」ことである。この実現のための理論と計算およびコンピューターシミュレーションを行っている。組み立てた分子を現実化するには、前駆体や置換基の適切で厳密な選択ばかりでなく、反応経路と反応条件の微妙な設定も要求される。したがって、分子構築から合成実現までを目的としている。このために、内外の実験グループと密に連携し実際の合成の可能性と予測した特性の実証を行っている。また、分子単独の設計ばかりでなく、幾つかの分子ユニットが自己集合的に組織化するナノ分子系も自由に理論予測できることを目指している。



(左から) LU, Jing、小林 郁、高木 望、永瀬 茂、石村和也、崔 隆基、李 秀栄

2. 生体分子の計算機シミュレーション

分子シミュレーションの手法により、蛋白質の折り畳み問題に取り組んでいる。特に、拡張アンサンブルに基づくモンテカルロ法や分子動力学法（例えば、マルチカノニカル法やレプリカ交換法）を使って、スーパーコンピュータ上のシミュレーションを行っている。これによって、シミュレーションがエネルギー極小状態に留まってしまうという、従来の方法の困難を回避している。計算手法の改良・開発とともに、エネルギー関数（特に、溶媒の寄与）の精度



(後列左から) 条 美和子、榮 慶丈、伊藤 暁、野口博司、村田克美、小久保裕功

(前列左から) BERG, Bernd A.、岡本祐幸、依田隆夫

を上げる努力もしている。ランダムコイル状態の初期構造から特異的立体構造への蛋白質の折り畳みを計算機上で再現するとともに、その熱力学的原理を解明することを目指している。

分子基礎理論第二研究部門

1. 化学反応動力学と原子分子衝突過程に代表される分子の動的諸過程の理論的研究

新しい分子を作り出す化学反応はこの世の有為転変の根源である。その動力学機構の究明と基礎理論の開発が我々の研究課題である。具体的には、以下のような課題に取り組んでいる：化学反応の起こりやすさを決めている因子の究明，多自由度系の動力学を扱う理論の開発，状態変化の基本メカニズムである非断熱遷移の理論の開発と応用，超励起分子の特異な性質と動力学の解明，多体系に現れる統計性と選択性の解明，及び分子過程の新しい制御方法の確立。



(後列左から) 神坂英幸、長屋州宣
(前列左から) KONDORSKIY, Alexey、中村宏樹、藤崎弘士

最近の特筆すべき成果は Landau, Zener, Stueckelberg 以来初めて非断熱遷移理論を完成した事であり、現在理論の更なる展開と応用を進めている。

2. 分子諸物性における量子効果とそれに及ぼす散逸の影響の研究

化学反応過程，非断熱的遷移過程における量子効果と散逸の研究，溶液中の分子の構造と運動が光学過程に及ぼす影響の研究，分子集合体における光物性，磁氣的性質，電子伝導などの研究，などを行っている。量子力学的 Fokker-Planck 方程式など非平衡統計力学などで用いられている手法や，経路積分法など場の量子論などで用いられている手法，量子化学計算など計算化学で用いられている手法などを用いる。



(左から) 加藤 毅、谷村吉隆、鈴木陽子

分子基礎理論第三研究部門 (客員研究部門)

1. 分子系のシミュレーションとダイナミクス

「次世代分子理論」を開発するとともに、わが国で初めての本格的な分子理論計算のプログラム・パッケージ「UTChem」を開発し、分子系のシミュレーションとダイナミクスに応用する。新しい分子理論の開発やアルゴリズム、ソフトウェアの開発をもとに、モデル系ではなくリアル系を対象とした数百から千原子系を扱える分子理論の構築とその実用化をめざしている。理論化学の対象を大幅に拡張し、分子レベルで発現する複雑性，機能発現，選択性の原理，概念を解き明

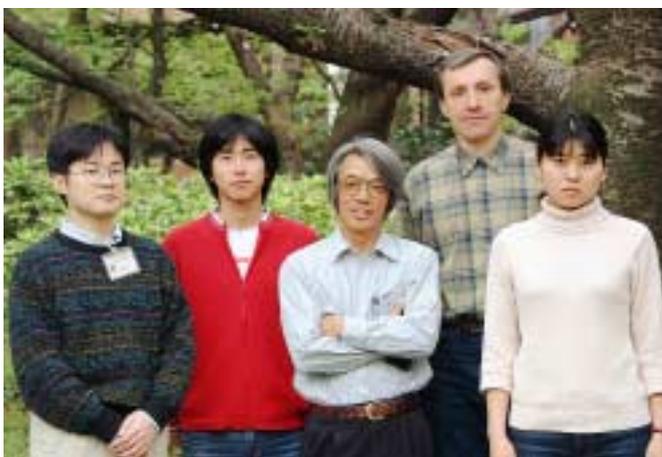
かし、それを制御する理論を構築したいと考えている。次の項目を重点的に研究したいと考えている。 数百原子系を定量的 (kcal/molの精度) に扱える新しいab initio分子理論の開発と応用。

千原子系を半定量的に扱える密度汎関数理論の開発と応用。 重い元素を対象とするために相対論的分子理論の開発と応用。 ab initio電子状態理論を基にする動力学理論の開発と応用。 分子計算プログラム・パッケージ「UTChem」の開発。

2. 化学反応は多次元ポテンシャルエネルギー曲面上の原子核の運動に他ならないが、多くの化学反応では、スピン軌道相互作用などによって、単一のポテンシャルエネルギー曲面だけでなく、電子的非断熱遷移を起こして、いろいろな電子状態間を渡り歩く。こうした化学反応過程における非断熱遷移の役割を明らかにするため、簡単な反応系から複雑系までを対象として、理論的な立場から研究を展開する。特に他の量子効果(共鳴, トンネル, 干渉)との関連についての理解を目指す。また、複雑な反応系にも適用可能な反応動力学シミュレーション法の開発も試みたい。

分子基礎理論第四研究部門

1. 気相中では全く起きない反応が溶媒中では起きてしまう、あるいは、溶媒を変えると反応速度が大きく変化するという現象は実験化学者が日常的に経験していることである。生物体内の酵素の構造やそれによって触媒される化学反応も「水」という溶媒を抜きには考えられない。当グループでは溶液中の分子の電子状態、構造、反応性、反応速度などの化学的性質に溶媒がどのような影響を及ぼすかという問題を液体の統計力学に基礎を置く分子論の立場から解明しようとしている。イオンの周りの溶媒の揺らぎから蛋白質の立体構造まで広範な現象が研究対象となる。



(後列左から) 山崎 健、KOVALENKO, Andriy F.,
(前列左から) 佐藤啓文、平田文男、渡辺あゆみ

2. 分子にはいろんな機能があるが、集まることによって初めて現われる性質があり、それらは制御できる。例えば、組成変化、加圧、光照射などで環境をわずかに変えると、結晶構造や色が変わったり、磁性をもったり、超伝導になったりすることがある。こうした変化に向かう局所的な“たね”が競合しながら成長・増殖して、もの全体の性質を変えてしまうこともある。微視的にみると集団としての電子の量子力学的な性質が変わっている。これらの物性の発現機構やダイナミクスを理論的に研究する。



(左から) 米満賢治、大塚雄一、宮下尚之、岸根順一郎

分子構造研究系

本研究系は構造から出発して分子のもつ諸性質を明らかにすることを目指している。単離状態の比較的簡単な分子から固体表面に吸着した分子や配向凝集系までを広く対象とし、空間分解能と時間分解能をもつ分光測定を進める。高励起状態や反応中間体など動的過程についても、構造論の立場から積極的にとりあげることにより、分子及び分子集合体のもつ様々な機能の解明に資する。

分子構造学第一研究部門

1. 時間的・空間的に高い分解能を持つ新たな測定法の開発と、それによる分子・分子集合体の動的挙動や機能の解明を目指した基礎的研究。最新のレーザー分光技術によって、ピコ秒・フェムト秒オーダーの時間分解能が実現できる。また最近では近接場光学の手法によって、光の回折限界（従来の光学顕微鏡での空間分解能）を超える、ナノメートルオーダーの空間分解能が実現可能である。これらの手法の融合によって、微小な領域における分子の動的挙動に迫る分子分光法の確立をめざし、超分子等の分子集合体や、液相中の分子ダイナミックスの挙動を調べる。



（左から） 岡本裕巳、磯貝美穂、井村考平、永原哲彦

2. 光による気体原子の並進運動の制御や新しい運動状態の実現を目標として、レーザーによって原子を mK 以下の極低温にまで冷却するレーザー冷却、及びレーザー光の中に原子を閉じ込めるレーザートラップの研究を行っている。



森田紀夫

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

1. シトクロム c_3 における電子移動制御についてNMRを主要な手段として研究している。このタンパク質は4つのヘムを持ち、c型ヘムとしては異常に低い酸化還元電位を持つ。このタンパク質の酸化還元と構造変化の詳細を明らかにするために、 ^{15}N 標識試料を用いて完全酸化型および完全還元型の構造決定を進めている。また、われわれは *Shewanella oneidensis* を宿主とするシトクロム c_3 大量発現系を確立することに成功し、アミノ酸置換の研究も進めている。

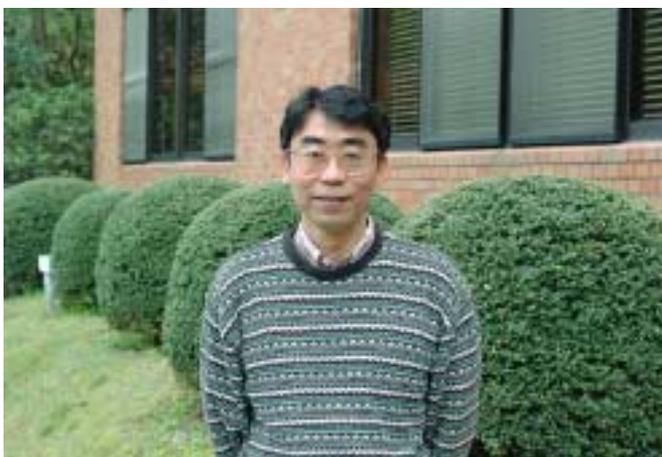
2. 物質の界面近傍のみを特異的にとらえることのできる分光法

（和周波発生法）を用いて、固体表面におけるピコ秒オーダーの動的挙動を研究する。特に、近赤外光パルス照射による基盤表面の急激な温度上昇で引き起こされる吸着分子の動的挙動や、可視・紫外域の光パルスにより励起された電子によって引き起こされる吸着分子の変化を観測し、電子・格子と吸着分子の相互作用について総合的な検討を行う。

分子動力学研究部門

1. ナノスケール磁性薄膜の磁気特性とその分子科学的制御

ナノスケール磁性薄膜がしばしば示す、古典的には説明できない物性を研究する。特に、薄膜の磁気特性の表面修飾による変化を、分子の吸着などの表面分子科学的な観点から、超高真空中での磁性薄膜の磁気特性の制御を検討する。実験室での磁気光学 Kerr 効果測定に加えて、UVSOR からの軟X線を利用したX線吸収分光やX線磁気円二色性などの活用も計画中である。



横山利彦

2. 凝集系の分子分光学研究

凝集系でしかできない分子分光学研究をめざしている。分子間相互作用や、分子内ポテンシャルに由来する動力学を電子スピン共鳴法や振動ラマン法で観測している。最近のターゲットは金属内包フラーレン並びにその複合体のスピン状態、液晶分子の相転移など。



（後列左から）大窪清吾、林直毅
（前列左から）古川貢、松岡秀人、加藤立久、外山南美樹

電子構造研究系

電子構造研究系では、分子および分子の集合体がそれらの電子構造の違いによって多様な固有の性質を発現することに注目し、化学反応、電子移動、エネルギー移動、情報伝達などの分子機構を電子構造の立場から明らかにし、物質・エネルギー変換の分子論的基礎を確立することを目指している。

基礎電子化学研究部門

1. 新しい機能性金属・有機複合クラスターの研究：クラスター分子磁石の開発と構造，磁気物性

金属を含むクラスターは、反応触媒や磁氣的電氣的な素子への応用に通じる様々な機能を有している。金属原子を有機分子系で繋ぎ、金属原子間のスピン・スピン相互作用を制御することによって強磁性的な性格を持たせることが可能である。最近、コバルト・炭素複合クラスターがマトリックス中で磁石になることを見いだしたが、このような単分子磁石の磁氣的な性質の発現機構を調べながら、残留磁化や保持力が増大する系の構築を模索している。また、極低温STMによるクラスター分子の直接観測をスタートさせた。



(後列左から)小杉健太郎、白井千夏、日野和之
(前列左から)鈴木優子、笥美知子、大下慶次郎、井口佳哉、中林孝和、西信之

2. クラスターイオンにおける電荷共鳴・電荷移動・電荷ホッピング

分子がクラスターを形成するのは、水素結合のような静電力によるものの他に、電荷共鳴や電荷移動といった動的な共鳴がある。これらは、電子が分子間を移動し、分子間の軌道の大きな重なりを生むことによって大きな安定化エネルギーを得ている。一方、プロトンが結合に関与したクラスターでは、プロトンがどの分子サイトに着くかによってその構造が大きく変わることがある。このような電荷の動的な変化をもたらすクラスター構造のダイナミックな変化を、Z型あるいはL型トリプル四重極質量選別イオントラップレーザー共鳴分光法によって調べている。

3. 溶液中のマイクロクラスター構造とその機能の研究

水やアルコールなどの水素結合性溶媒は、自己会合能力が高く、バラバラになって他の媒体にはいりこむには、大きなエネルギーを要する。水の中に見られる疎水性水和や疎水結合は水分子同士の会合特性がなせる技である。このような分子レベルでの溶媒や溶質の会合状況を、分子間振動スペクトル、X線回折、溶液の断熱膨張によって分離したクラスターの質量分析法などによって調べている。

電子状態動力学研究部門

1. イオン化検出赤外分光法による孤立分子・クラスターの高振動状態の研究

波長可変赤外レーザーで生じる振動励起分子を紫外レーザーにより選択的にイオン化して検出するイオン化検出赤外分光法により、孤立分子状態での高振動状態を観測する。さらに、高振動状態からの緩和過程（反応初期過程）や振動誘起反応の可能性を追求する。



（後列左から）佐伯盛久、酒井 誠、石内俊一
（中列左から）渡邊武史
（前列左から）篠崎美名子、藤井正明、稲垣いつ子

2. パルス電場イオン化(PFI Z E K E)光電子分光法による分子カチオンの振動分光

高励起リユードベリ状態を電場イオン化して検出する高分解能光電子分光法（分解能 $\sim 10^{-4}$ eV）により、分子カチオンの振動回転構造を観測し、気相分子カチオンの分子構造と緩和過程を研究する。

3. 赤外 - 紫外二重共鳴分光法による分子・クラスターの構造とその動的挙動

凝縮相の一部である、気相分子クラスターに赤外 - 紫外二重共鳴分光法である IR-Dip 分光法を適用し、基底状態 (S_0)、電子励起状態 (S_1)、カチオン (D_0) さらには、光反応生成物の赤外スペクトルを観測する。振動スペクトル解析および Ab initio MO 計算との比較から、分子・クラスターの構造と動的挙動の関係を研究する。

4. 化学反応の可視化と制御

高分解能画像観測装置を組み込んだ交差分子線装置により、反応性散乱の微分散乱断面積を求め、量子化学計算で求められたポテンシャル曲面上での散乱計算と詳細に比較することにより、反応動力学を明らかにする。フェムト秒時間分解光電子画像観測法により、孤立多原子分子や分子小集団における超高速位相緩和を実時間追跡し、非断熱動力学を明らかにする。



（後列左から）西澤 潔、松本剛昭、坪内雅明、高口博志
（前列左から）片柳英樹、鈴木俊法、西出龍弘

電子構造研究部門（客員研究部門）

- 1．カーボンナノチューブの研究
- 2．レーザーによる化学反応の制御

カーボンナノチューブを用いた新物質の開拓、およびフェムト秒位相制御パルス光源を用いた光反応制御の研究を行っている。後者では、フェムト秒実時間振動分光装置により、ポテンシャル交差点を通過する分子核波束の運動を可視化する。さらに、波形・位相制御パルス光によって分子核波束の波形・位相を反応座標面上で自由に变化させ、収率の制御を試みる。

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

分子及び分子集合体の性質とその機能をエネルギー変換の観点から広く研究する。そのため新しい物性をもつ物質系を斬新な手法を用いて合成・構築するとともに、その分子機能（光起電力、光触媒効果、表面電子移動、選択的触媒反応）発現の分子過程を分光学的手法等により研究し、化学的エネルギー変換の新しい原理を確立する。

分子集団研究系

分子集団研究系では新しい電子機能を持つ分子物質を設計，開発すると共に，電氣的，磁氣的，光学的実験や極低温，超高压等の条件下での種々の実験を通し，それらの新規物性の由来を解明する。これ等の研究を通し，分子物質の新物性の開拓と電子物性の統一的な理解，分子素子への展開を目指している。

物性化学研究部門

1. 分子性導体の物性研究

分子から分子へと移動する電子が分子性導体の様々な性質(物性)を担っている。分子性結晶では電子の遍歴性が弱いために，電子が一つの分子に閉じ込められた(局在)状態と隣の分子にまで広がった(非局在)状態の境界領域に位置する物質が多い。これらの物質の温度や圧力を変えると，濃淡のある電荷分布を持つ局在状態(電荷整列)と均一な電荷分布をもつ非局在状態(金属)との間を移り変わり(相転移)，それに伴って物性が大きく変化する。このような「電荷整列を伴う相転移」に興味をもって，一連の分子導体における温度・圧力依存性(相図)を主に反射分光法とラマン分光法を用いて研究している。

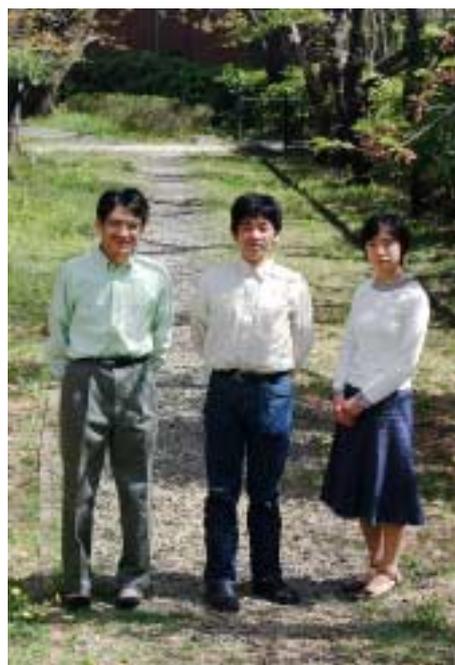


(後列左から)山本 貴、山本 薫、WOJCIECHOWSKI, Roman Piotr、
賣市幹大
(前列左から)鈴木研二、中野千賀子、DROZDOVA, Olga、
南坊城春奈、薬師久彌

2. 分子性導体の低温電子物性

分子性導体の示す特異な電子状態に関心を持ち，主に磁気共鳴(NMR，ESR)といった実験手法により研究を行っている。現在，以下のテーマが進行中である。

選択的同位体置換した試料によるNMR精密測定。金属-非金属転移における絶縁化機構・電荷局在状態の理解。ESRによる伝導電子の同定，金属-非金属転移や電荷局在・スピンドYNAMICKSの理解。

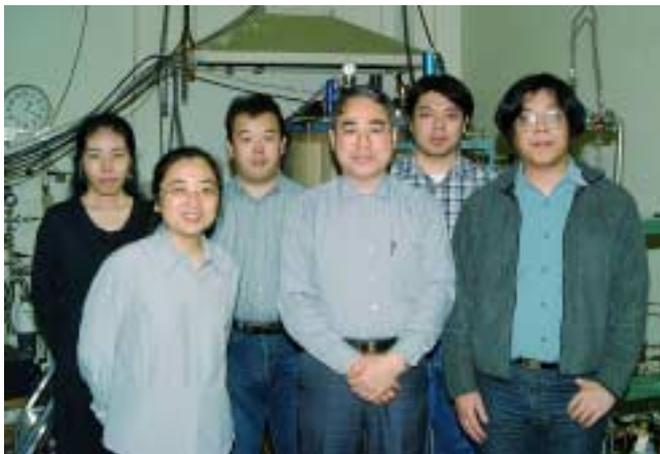


(左から) 藤山茂樹、中村敏和、南坊城春奈

分子集団動力学研究部門

1. 分子物質の新たな電子機能の開発と物性研究

分子の電子機能の研究は未来の電子デバイスの開発の基礎となるものと期待されている。本研究室では新しい電子機能を持つ分子物質の設計・開発・物性研究を行っている。現在の具体的なテーマは伝導電子と局在磁気モメントが共存する磁性超伝導体のような複合機能分子物質の開発、および複合機能の協奏作用によるスイッチング現象の発現とその解明、従来の常識を破る種類の分子だけで出来た金属・超伝導体・強磁性金属の開発と新しい機能性の発現、有機安定ラジカルをスピント源とする新しい金属性磁石の設計・合成、などである。



(後列左から)佐藤春菜、藤原秀紀、大塚岳夫
(前列左から)ZHANG, Bin、小林速男、岡野芳則

分子集団研究部門 (客員研究部門)

分子集団研究系と協力しながら、分子性金属・超伝導体、分子磁性体、有機磁性金属・超伝導体の開発、物性解明、分子スケールエレクトロニクス基礎、に関する研究を実施している。

相関領域研究系

本研究系では、分子科学と関連諸分野とが相関する領域を研究対象としている。有機化学、無機・錯体化学、さらには生体関連化学を視野の中に入れて広範な研究対象に関し、分子レベルでの新たなアプローチを目指している。

相関分子科学第一研究部門

分子性磁性体の開発及び物性研究

有機ラジカルと遷移金属からなる無機 - 有機ハイブリッド系を用いた新しい分子性強磁性体の構築研究及び、有機ラジカルのスピン間相互作用の研究を行っている。では配位子として高スピンのポリニトロキシドラジカルを用い、遷移金属イオンを介して自己組織化するという新しい分子磁石の構築方法を用いて高温の転移温度を持つ分子磁石や、キラルな分子磁石の構築研究を進めている。

では新規安定ラジカル結晶の磁性を詳しく解析することにより分子間のスピン磁気モーメントの相互作用について研究を行っている。



(後列) 鈴木健太郎
(中列左から)岡 芳美、BARANOV, Nikolai、加藤恵一
(前列左から)細越裕子、井上克也、今井宏之

相関分子科学第二研究部門 (客員研究部門)

金属内包フラーレンの構造と物性の基礎的研究と、フラーレン類を用いた多機能複合物質の開発を行う。

極端紫外光科学研究系

本研究系は、極端紫外光実験施設（UVSOR）のシンクロトロン放射光やレーザーを用い、極端紫外光科学の新分野を進展させる中核としての役割を果たす。特に、光化学の基礎過程、反応動力学、ナノ物質創製と評価などの研究を新しい実験手法の開発とともに推進する。

基礎光化学研究部門

軟X線光物性・光化学：内殻励起のダイナミクス

軟X線と分子の相互作用の基礎過程を研究している。特に、UVSOR施設からの放射光軟X線を利用して、分子の内殻電子を励起・イオン化し、そのダイナミクスを調べている。内殻電子は原子に局在しており、同じ元素であっても化学結合の違いによってエネルギーレベルが異なる。そのため、分子内の個々の原子を選択的に励起・イオン化できる。このような特徴を生かして、価電子励起・イオン化では知られていないような新しい現象を探索し、また、その現象のメカニズムを解明している。さらに分子の物性評価に応用できる新しい内殻分光法も開拓している。



（左から） CARRAVETTA, Vincenzo、陰地 宏、初井宇記、小杉信博、永園 充、益田周防海、中根淳子

反応動力学研究部門

気相、固相及び表面における化学反応の動力学現象の解明を目的として、シンクロトロン放射光や紫外・可視レーザーを用いて以下の研究を行っている。

1. 放射光照射による半導体表面光化学反応の基礎課程および、放射光エッチングなどによる表面ナノ構造形成の研究を行う。また、このようにして形成した表面微細構造を利用した自己組織化反応により、半導体特にシリコン表面に生体物質を集積し生体機能の発現を目指す。当グループで開発した新しい赤外反射吸収分光法により集積構造を評価するとともにSTMやAFMにより構造や反応機構を原子・分子レベルで評価解析する。



（後列左から）王長順、王志宏、藤木 聡、滝沢守雄
（中列左から）MORÉ, Sam Dylan、宇理須恆雄、清水厚子
（前列左から）野々垣陽一、山村周作、RAHMAN, Mashiur

2. 光子エネルギーが10から200電子ボルトのシンクロトロン放射を用いて、分子やナノメタ-物質の超励起状態の検出とその自動イオン化および単分子的解離反応の機構を解明する。主な実験手法は2次元光電子分光、質量分析、蛍光分散分光およびレーザー誘起蛍光分光である。

3. パルスまたは連続発振レーザーとシンクロトロン放射を組み合わせたポンプ・プローブおよび2重共鳴分光実験システムを開発する。多電子励起状態や光学禁制状態を生成したり、特定の化学結合に局在した電子遷移を惹起することで、特異な光解離反応ルートの開拓を目指す。



(左から) 春山祐介、江潤卿、森崇徳、見附孝一郎

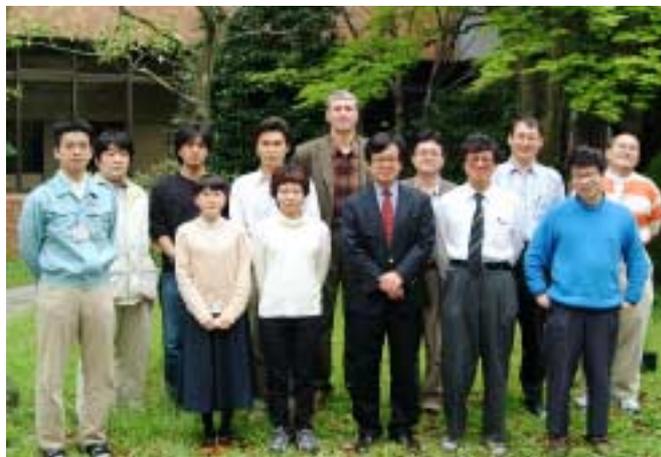
極端紫外光研究部門 (外国人客員研究部門)

極端紫外光科学研究系及び他の研究系にまたがって分子・分子集合体の物性並びに反応に関する、幅広い分子科学的研究を行っている。

研究施設

分子制御レーザー開発研究センター

分子科学が急速かつ高度に進歩し続けているため、市販のレーザー装置を購入しそのまま利用していたのでは、重要な研究手段であるレーザー装置の性能に限度があり、先端的分子科学研究を推進するには不十分な状況である。分子制御レーザー開発研究センターは、新しい分子科学研究を切り開く、高性能かつ新規なレーザーシステムを自ら開発することを目指している。



開発中のレーザーならびに担当研究部は以下の通りである。

(後列左から) 佐藤庸一、齋川次郎、石月秀貴、DASCALU, Traian、庄司一郎、山中孝弥、大竹秀幸
(前列左から) 上田 正、岡本佐知子、米倉貞恵、平等拓範、藤井正明、猿倉信彦

- 1) 分子位相制御レーザー開発研究部 (公募準備中)

光の位相を利用した化学反応制御のためのレーザー開発

- 2) 放射光同期レーザー開発研究部 (猿倉信彦助教授, 大竹秀幸助手)

超励起分子反応制御のための放射光同期レーザー開発

- 3) 特殊波長レーザー開発研究部 (平等拓範助教授, 庄司一郎助手)

真空紫外・遠赤外光による反応制御のための高性能特殊波長レーザー開発

また、種々のレーザー、分光装置、測定機器を共同利用機器として管理し提供している。レーザー分光機器のうち共通性があり、かつ最高級のもを集中管理し、二重投資を防止するとともに常時高性能を維持し、研究所内外の研究者の利用に供している。共通機器の保守管理サービスは全職員が分担して行っている。

レーザー開発センター棟 (1,053 m³) には、分光測定室 (4室)、レーザー室 (8室)、があるほか外来施設利用研究者のための準備室なども備えている。

主な設備品

フーリエ変換赤外分光光度計 (BOMEM DA3), 円二色性分散計 (日本分光 J-720W), 固体波長可変超短パルスレーザー (Spectra Physics, Tunami, 再生増幅器), Nd:YAG 励起色素レーザー (Quanta-Ray DCR 2A, PDL3), Nd:YAG レーザー (Quanta-Ray GCR 250), エキシマー励起色素レーザー (Lambda Physik LPX105i, LPX205i, LPD3002, COMPex110M, SCANmate 2E), フッ素系エキシマーレーザー (COMPex 110F), シンクロナス励起OPOレーザー (Spectra Physics OPAL), Nd:YAG 励起OPOレーザー (Coherent INFINITY, Lambda Physik SCANmate OPPO), 高感度蛍光分光光度計 (Spex Fluorolog II), 紫外分光光度計 (日立 U-3500)。

このほか貸出用 (所内における共同研究, 短期の開発研究の目的のため) 小型機器として, 高圧電源, アンメーター, オシロスコープ, ボックスカー積分器, ロックイン増幅器, シグナルアペレージャー, 記録計等を備えている。平成5年度より上記のレーザー分光機器及び小型機器の貸出し予約システムをオンライン化し, 所内外の利用の効率化を図っている。

分子スケールナノサイエンスセンター

物質を分子スケールで観測する様々な分光分析法の著しい進歩は、分子や分子集合体の高次な構造を精密にまた動的に取り扱うことを可能としてきた。一方、走査トンネル顕微鏡や高分解能透過電子顕微鏡の発達は、分子や分子集合体を直接に「観る」時代をもたらし、直接的な操作による機能性分子素子あるいは分子集合系の構築を可能にしつつある。分子科学研究所では、これまでの量子化学や統計力学によって培われた分子科学の成果と機能性分子の設計・合成における先端的な成果を融合させ、これらをナノスケールの諸現象解明や新しい物質系の構築に生かして「分子スケールの機能解明と機能開発」を目指す新しい科学を開拓するために分子スケールナノサイエンスセンターを発足させた。



(後列左から)清原公平、横山高博、吉村大介、奥平幸司、高嶋圭史、加藤清則、新美さとみ、高林康裕、細川洋一、高山敬史
(中列左から)佐々木時代、松本太輝、佃達哉、鈴木博子、久保園芳博、田中彰治、白沢信彦、菊澤良弘、牧田誠二
(前列左から)茅幸二、小丸忠和、李艶君、小宮山政晴、戸村正章、永田 央、柴山日出男

本センターは、規模において大部門に相当する3つの専任研究部門と2つの流動部門から構成されており、研究系とセンターという枠を越えた所内の共同研究や、所外の様々な専門分野の研究者との共同研究を積極的に推進し、新しい研究分野の開拓を行うために相応しい組織となっている。また、本センターは、分子科学の研究に共通性の高い物性機器の集中管理、低温冷媒の供給、化学試料の分析を行い研究者の利用に供したり、実験廃棄物の管理や処理も行っている。

研究部門の構成及び研究内容は、以下の通りである。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門：

特異な光・電子機能を有する有機薄膜素子および単一分子素子の構築の礎となる、分子の設計と開発、組織化および計測を行い、基本的物性および動作原理を解明するとともに、それに必要な新しい実験手法を確立し、新しい学問領域と技術基盤を創成することを目標とする。

ナノ触媒・生命分子素子研究部門：

ナノスケールの触媒群の合理設計や生体ナノ反応場の構築を行い、触媒機能発現機構の精密な解明と理解、全く新しい機能を発現する新触媒創製、従来にない超高活性触媒や新機能反応場の開発を目指す。

ナノ光計測研究部門：

分子科学研究所が長年培ってきた独創的レーザー分光法と光源開発力を基盤として、新たなナノ空間計測法と分子制御法を開拓し、ナノ空間内の現象解明とその分子科学的応用を行なう。また、極端紫外実験施設に高輝度挿入光源を設置して先端的極端紫外光源の開発を行なうとともに、ナノシステムの構造評価、分子メス、ナノ反応場創製の研究に応用する。

界面分子科学研究部門（流動研究部門）：

ナノスケール表面解析手法による固-気および固-液界面における原子・分子の吸着構

造とその反応性の解明，シンクロトロン放射光による有機薄膜の表面物性の研究，およびフラーレンをベースにした界面・ナノ物性の開拓を行なう。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）：

強磁場による化学反応・物理変化制御，化学反応のポテンシャル面の効率的生成，および優れたリサイクル能をもつナノデバイスの開発を行う。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

1．電界効果トランジスタ（FET）の作製と特性評価

有機半導体の真空蒸着膜あるいは電気化学堆積膜を用いたFETを作製し，キャリア注入・輸送機構を解明して高移動度素子の作製指針を導出する。また電極間隔をナノメートルスケールにまで小さくして，単一グレイン，微粒子などの特性を調べる。



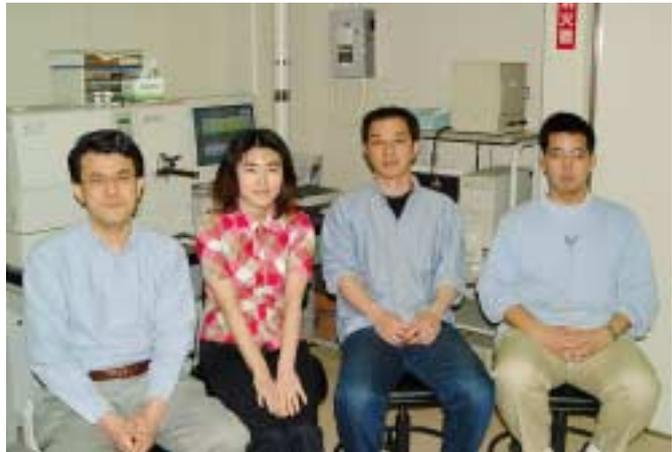
（後列左から）荒正人、山田亮、藤原栄一、多田博一
（前列左から）高田正基、大石修

2．シリコン-炭素共有結合性ナノインターフェースの構築

シリコン基板上に分子を直接結合し，シリコン-炭素結合を起点とする分子組織体を構築し，信号の入出力インターフェースとしての特性を調べる。

3．分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

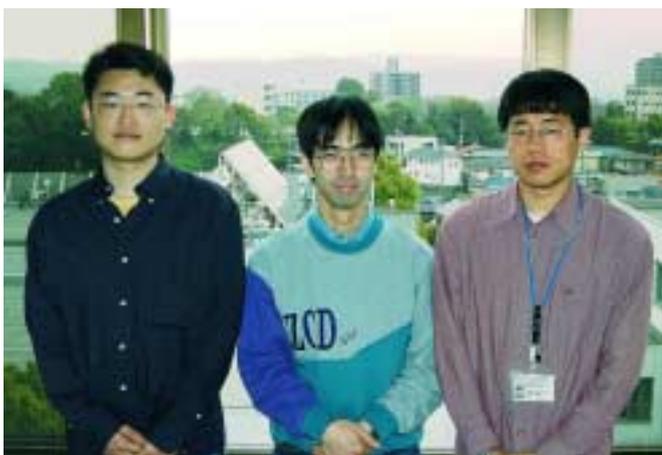
新しい電子物性を目指した分子物質開発のため，電子系有機分子の設計と合成を行う。特に，有機エレクトロルミネッセンス素子のためのアモルファス性電子輸送材料や有機トランジスタのためのn型半導体の開発を進めている。



（左から）鈴木敏泰、伊藤歌奈女、阪元洋一、白沢信彦

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

光合成を規範とする人工の物質変換システムの構築を目指して研究を進めている。具体的な研究テーマは以下の通りである。光励起電子移動と化学反応が組み合わさって進行する系を開発する。電子移動によって駆動される触媒的物質変換反応を開発する。ナノメートルサイズの物質の電気化学的特性について調べ、電子移動反応への展開をはかる。



(左から) 細川洋一、永田 央、菊澤良弘

ナノ光計測研究部門

金属ナノクラスターの創製と触媒機能

有機分子によって保護・安定化された金属ナノクラスターを大量に調製し、それらの構造と反応性を調べている。特に、生成・分離・評価という一連の調製プロセスに対して様々な技術を開発・導入しながら、サイズが揃ったクラスターの調製法の開拓に取り組んでいる。金属クラスターのサイズ特異的な触媒機能の発現機構を明らかにすると共に、新規ナノ触媒の創出を目指す。



(後列左から) 臼井千夏、佃 達哉
(前列左から) 村山美乃、根岸雄一

界面分子科学研究部門 (流動研究部門)

1. 空間分解分光法による光と固体表面ナノ構造との相互作用の研究

固体光触媒表面で起る光触媒化学反応は、光(主に紫外光)照射によって惹き起される固体光触媒バルクおよび表面での電子励起と、それに引き続く不均一触媒化学反応により構成されている。前者は通常、周期境界条件を仮定する、いわば無限の結晶構造を想定したバンドモデルで説明され、一方それに引き続く不均一触媒化学反応は、個々の反応分子と、触媒表面に存在するナノメートルオーダーの吸着サイトならびに反応サイトとの相互作用に強く依存する、すぐれて局所的な現象である。空間的には両極端を想定するこの両プロセスを包含した固体光触媒反応の統合的理解には、光による電子励起過程とその後の物理プロセスの原子レベルでの局所挙動に関する解明が必要不可欠である。

ここではこの目的のために、空間分解能の非常に高い走査型トンネル顕微鏡(STM)に分光測定機能を付加した、いわば空間分解分光法とも言うべき方法を使用する。この方法により、不

均一系固体光触媒の局所構造ならびにそこにおける電子状態をナノおよび原子のレベルで観察し、その光触媒活性と局所構造および局所電子状態との相関を明らかにして、光・触媒表面・反応分子間の相互作用をナノ・原子のレベルで理解しようと試みる。またここで開発・使用される空間分解分光法は、固体光触媒のみならず、太陽電池や微粒子レーザーなどにおける光と固体との相互作用とその表面ナノ構造との関係を知るための研究にも拡張できるものと期待している。



(後列左から)高嶋圭史、久保園芳博、横山高博、吉村大介、松本太輝、清原公平
(前列左から)高林康裕、佐々木時代、李 艶君、小宮山政晴、奥平幸司

2. シンクロトロン放射光による有機薄膜の表面物性の研究

有機分子は数百万種におよび、さらに官能基の種類を変えることにより新しい機能の導入が可能である。このような有機分子からなる薄膜は高機能をもつ電子デバイスとして期待されているが、表示素子としてはすでに実用化がはじまっている。有機デバイスの特性は、それを構成している有機分子の種類だけでなく、膜表面の構造(分子配向)や電子状態と深く関連している。われわれは、種々の基板(グラファイトなどの層間化合物や金属)上に作成した単分子層のオーダーで制御された有機超薄膜、実用素子により近いが複雑な構造をもつ高分子薄膜等に注目する。波長選択性、直線偏光性というすぐれた特性をもつシンクロトロン放射光による角度分解紫外光電子分光を中心とした表面敏感な測定法を用いて、有機薄膜の表面および有機/無機(金属)界面の構造(分子配向の定量的決定)と電子状態を明らかにすることを目的としている。

3. フラーレンをベースにした界面・ナノ物性の開拓

炭素原子がケージを構成した分子であるフラーレンは、それ自身が1 nm程度の大きさをもつために、ナノサイエンス・ナノテクノロジーの基幹物質としての期待が高まっている。フラーレンは、固体において超伝導、低次元物性、強磁性を始めとする興味深い性質を示してきた。最近では、フラーレン結晶を用いた電界効果トランジスター(FET)構造によって117 Kという極めて高い超伝導も実現している。FETにおいては、ゲート電極に電場をかけることによって絶縁膜であるアルミナから結晶に電子やホールが導入されて超伝導が実現しており、アルミナとフラーレン結晶の界面が超伝導実現の鍵を握っていると考えられている。現在、我々は、フラーレン薄膜によるFETの研究を進めており、強誘電性絶縁膜を利用することによる高キャリア導入時の物性の探索を行っている。また、*p*-シリコンへのフラーレンの蒸着によって*pn*接合の実現に向けた研究を進めている。これらは、フラーレンの界面での物性発現を目指した例である。一方、ナノメータサイズでの物性を探索するために、フラーレンをシリコン清浄表面に蒸着して、ナノメータサイズで様々なパターンを形成し、ナノメータサイズのフラーレンパターンを走査トンネル顕微鏡(STM)で直接観察するとともに、その電子状態を走査トンネル分光(STS)で調べる研究を進めている。さらに、ナノメータサイズでの直接的な電気伝導測定の手法についても研究を行っている。この研究のターゲットとなるフラーレンは、金属原子をケージに内包した金属内包フラーレンや、カーボンナノチューブとの複合系などの多岐に渡っており、量子伝導特性のように固体では現れなかった物性がナノメータサイズでは出現してくることが期待される。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

1. 超強磁場による化学反応・物理変化の制御

物質固有の特性のひとつである磁性が、化学反応、物理変化や生物の行動にどのような影響を与えるのか、そのメカニズムを解明するとともに、磁性による化学反応・物理変化の制御

磁場による反応制御 についてこれまで種々の研究を行ってきた。例えば、磁場を利用して、高度に配向した結晶や薄膜など高品位な物性を持つ物質の創出を試みる研究や、有機光化学反応の磁場効果などの研究を行ってきた。ここでは特に、

“15テスラ”の超強磁場が、金属樹成長反応、光触媒反応などの化学反応やベンゾフェノンの結晶成長・カーボンナノチューブの配向といった物理過程にどのような影響を与えるのか、ナノ構造・クラスター構造の磁場制御などを視野に入れた特色ある研究にチャレンジする計画である。



（左から） 太田明代、上地一郎、藤原昌夫、大庭亨、石田俊正、谷本能文、藤原海人

2. 化学反応のポテンシャル面の効率的生成

分子の反応を主に対象として、コンピュータを用いて研究を行っている。最近主に進めている研究は、反応のポテンシャル面の効率的で簡便な生成法である。ポテンシャル面とは、原子核のさまざまな相対的な位置に対する位置エネルギーを立体的に表したものである。原子核を動かしながら電子の運動について調べる方法も実用されているが、計算が大変である。そこで、内挿法に基づく簡便で効率的なポテンシャル面の生成法を探索している。うまくいけば、たとえば、大気汚染に関係する反応などを理論的に調べたりするのがますます効率的に行われると期待される。

3. 優れたリサイクル能をもつナノデバイスの開発

次世代のデバイスには高い集積度だけでなく、必要なときだけ機能し、不要になったら容易に分解・リサイクルできるような性質をもたせたい。我々は自己会合性分子に種々の機能を付与し、そうした「機能ブロック」を会合させることにより、上記のコンセプトに基づくデバイスの実現を目指している。本年度はこれまで用いてきた「機能ブロック」を改良し、デバイスの機能の多様化とリサイクル能の向上を図りたいと考えている。

装置開発室

装置開発室の使命は、装置開発室独自にあるいは各研究部門との協力によって、分子科学研究に必要な実験装置を設計・製作し、また新しい装置を研究・開発することにある。従来から装置開発室では、研究者の依頼を受けて様々な新しい装置を製作するという業務を通じて、高度な装置技術を蓄積してきた。この技術を積極的に生かし、装置開発室本来の活動がより活発に行えるように、現在、テクニカルサービス、特別装置、基盤技術育成の3部門からなる構成で業務を行っている。

テクニカルサービスでは研究者の依頼に応じて、メカトロニクス、エレクトロニクス、ニューマテリアルの各担当者が、機械、電子回路、ガラス装置の製作・改良などを行い、所内の研究を日常的に支える役割を担っている。また各工作室では研究者自らが作業を行えるようにもしてある。

特別装置部門では新しい発想の先端の実験装置を所内から公募し、提案者と一体となってその設計・製作にあたる。

基盤技術育成部門では体系化した知識と技術の習得を目指して、各構成員の担当分野において基礎となる技術の調査・研究を行う。

装置開発室においては、これら三者の協力に基づく総合力によって、技術を基盤とした分子科学の新しい展開を常に追及している。



(後列左から)水谷伸雄、内山功一、鈴木光一
 (中列左から)宮下治美、豊田朋範、松下幸司、吉田久史、高松軍三、
 浦野宏子、矢野隆行、高松宣輝
 (前列左から)薬師久彌、渡邊三千雄、永田正明

主な設備備品

〔メカトロニクス・セクション〕

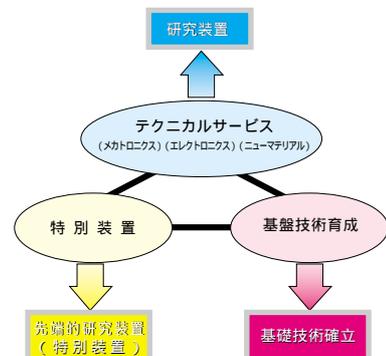
マシニングセンター (マキノ BN1-85), NC フライス盤 (マキノ KGNCC-70), ワイヤ放電加工機 (シャルミー ROBOF1L2020SI), 放電加工機 (ソデック A35R), ワイヤ放電加工機 (三菱 DWC90H), 電子ビーム溶接機 (日本電気 EWB), 正面旋盤 (西部工機 LHS-3616), 他一般工作機械及び CAD・CAM システムなど。

〔エレクトロニクス・セクション〕

2GHz サンプリング デジタルオシロスコープ (レクロイ 7200A), 1GHz オシロスコープ (テクトロニクス 7104), スペクトラムアナライザ (アドバンテスト R3361B), サンプリグスコープ (岩通 SUS601B), ネットワークアナライザ (パイオメーション K100D), LCA 開発システム (AMD), プリント基板自動製作システム (LPKF), インピーダンス・ゲイン・フェーズ・アナライザ (YHP) など。

〔ニューマテリアル・セクション〕

ガラス旋盤 (理研 GL-4DLH), 超音波加工機 (日本電子工業 UM500), バンドソーイングマシン (LUXO VW-55) など。



極端紫外光実験施設

シンクロトロン放射光（SR）は、遠赤外から極端紫外、X線にわたる波長連続の強くて安定な“夢の光”であり、また、指向性、偏光性、パルス性、清浄性といった数々の優れた特徴を持っている。このSRを利用する極端紫外光実験施設は、大型研究設備の一環として建設され、昭和57年（1982年）から研究施設として独立した。（大型研究設備の項参照。）昭和59年（1984年）9月から所内外の利用実験を開始し、現在年間140件を超える研究が活発に行われている（48頁参照）。

研究分野は大きく分けて、7つの分野に分類される（分野1：分光実験、分野2：光電子分光実験、分野3：光化学実験、分野4：化学反応素過程実験、分野5：固体・表面光化学実験、分野6：光励起新物質合成実験、分野7：顕微分光実験）。現在は、第一期の建設期、第二期の拡張期を経て、第三期目の再構築期になり、将来に向けての重要な時期となった。そのため、放射光分子科学の視点からの点検評価が行われると共に将来計画委員会などが開かれた。また、所外ユーザーを含むUVSORワークショップが毎年開かれ、各研究分野とチームラインの発展についての熱心な検討を行ってきた。その結果を踏まえ、光源加速器の高度化計画を立案するに至った。

幸いにして平成14年度予算において、UVSOR施設の光源性能を向上し、10年間程度の世界的競争力を維持していくために立案された光源加速器の高度化計画（光源加速器の低エミッタンス化（高輝度化）と短直線部の増強）が認められ、現在その準備作業が進んでいる。また、高度化に先行してBL7Aに新しいアンジュレータ（真空封止型）を導入し、性能評価へ向けた立ち上げ作業が行われている。なお、今回の計画には、高度化の性能を引き出すためのアンジュレータラインBL3AとBL5Aの再構築計画も含まれており、平成15年度後期より新生UVSORからの高輝度放射光を利用した世界的な研究成果が期待される。

光源グループは光源加速器の性能向上にかかわる開発研究を行うとともに、自由電子レーザーやビーム物理などに関する実験的研究を行っている。近年は特に、蓄積リング型FELの実用化、すなわち実際の分光実験に利用することを目指して、レーザーパワーの増強と安定的発振に主眼をおいた開発研究を行っている。その結果、蓄積リング型FELを放射光と組み合わせた二色実験としては世界初となる、Xe原子の二光子共鳴自動イオン化状態の観測に平成13年度に成功した。

観測グループは施設利用ビームラインを利用する全国の大学、研究機関からのユーザー（年間約800名）の支援業務を行いながら、ビームラインの性能向上に関わる開発研究として、新しい分光器や実験装置の設計、製作、調整および性能評価を行っている。さらに、観測グループの研究者は、放射光分子科学における新分野を開拓するべく、所内外の研究者や外国人研究者と共同して新しい方法論や実験手法の開発を行い、活発な研究活動を展開している。固体・表面グループは、有機伝導体・f電子系などの電子相関の強い系の電子状態や、清浄表面に作成された量子ナ



（左列前から）松戸修、加藤政博、蓮本正美、
繁政英治、東純平、西龍彦、
近藤直範、中村永研、山崎潤一郎、
神本文市、小杉信博、高橋和敏、
下條竜夫
（中列前から）保坂将人、木村真一、鬼武尚子
（右列前から）持箸晃、田中仙君、林憲志、
萩原久代

ノ構造の電子状態の研究を、放射光を用いた角度分解光電子分光や赤外磁気光学を使って行っている。また、気体グループは、高分解能斜入射分光器を利用した対称性分離分光やしきい電子分光、並びに各種の同時計測分光法の開発を行い、内殻励起分子に特有なダイナミクスの解明を目指した研究を行っている。

主な設備備品

[光源加速器]

15 MeV 線型加速器, 600 MeV シンクロトロン, 750 MeV ストレージリング, アンジュレータ, オプティカルサイクロトロン, 真空封止アンジュレータ

[観測系ビームライン(高度化前)]

BL1A 軟X線吸収分光装置, BL1B 固体真空紫外分光装置(1), BL2A 真空紫外分光装置, BL2B1 固体吸収・光電子分光装置, BL3A1 アンジュレータ光照射装置, BL3A2 気体イオン化測定装置, BL3B 気体光電子分光装置, BL4A 表面光化学反応装置(1), BL4B 軟X線固体・気体分光装置, BL5A 固体・表面光電子分光装置, BL5B 機器較正装置, BL6A1 フーリエ変換赤外・遠赤外分光装置, BL6A2 固体・表面光電子分光装置, BL6B 表面光化学反応装置(2), BL7A アンジュレータ光分光照射装置(予定), BL7B 固体真空紫外分光装置(2), BL8A 利用者持込みポート用装置, BL8B1 固体・気体吸収測定装置, BL8B2 角度分解紫外光電子分光装置

錯体化学実験施設

一つの金属あるいは金属イオンと配位子（原子または分子）から構成された単核錯体，複数個の金属イオンと配位子からなる多核錯体，さらにそれらの金属錯体が高分子化した無機固体物質を研究対象とする錯体化学は，金属と配位子の結合を通じて，その構造と物性を追求し，新しい機能を創造することをなすうる学問領域である。全元素を対象とした物質化学としての錯体化学は他研究領域の発展にも大きな貢献を行っている。

本実験施設は昭和59年4月に錯体触媒研究部門と錯体合成研究部門（流動）の2部門をもって開設され，昭和61年度に新たに配位結合研究部門（客員）を加え，平成元年度よりさらに錯体物性研究部門が新設された。錯体合成研究部門（流動）は平成12年4月に廃止となり，錯体化学実験施設は3部門となった。各部門は南実験棟で研究を行っている。

錯体触媒研究部門

私たちは遷移金属錯体の特性を活かした新しい触媒反応，特に合成的にも有用な触媒的有機反応の開発を中心研究課題としています。生体などではむしろ一般的である「水」や「高分子ゲル」などを反応メディアとする触媒作用を，純化学的に司る新しい反応駆動力や制御概念の提出を目指しています。精密な触媒挙動の解析と共に，反応メディアや添加物をも含めたマクロな反応系全体の設計を試み，立体および化学選択性の高度な制御に挑みます。



（後列左から）木村将浩、HOCKE, Heiko、中井康司、山野井慶徳、竹中和浩、魚住泰広
（前列左から）玉木浩貴、李學俊、柴富一孝、小林幸業

錯体物性研究部門

1. 金属イオンに合目的な配位子を導入した金属錯体は特異的な機能を発現させることが可能となる。自然界での窒素、酸素、二酸化炭素等の無機化合物から有機化合物への変換過程、ならびに生体系での最も基本的なエネルギー獲得手段である細胞膜内外のプロトン濃度勾配からのエネルギー変換過程には金属錯体の酸化還元反応が中心的な役割を担っている。これらのことから、金属錯体上でのアコーヒドロキシ基間の酸・塩基平衡反応に金属錯体の酸化還元反応をカップルさせることにより、人工的な系でのプロトン濃度勾配からのエネルギー変換を行う。また、金属錯体による二酸化炭素還元反応を中心テーマとして研究を行う。



(後列左から) 結城雅弘、筒井香奈子、山口ゆみ子、岡村 玲、東門孝志、安江崇弘、相原秀典、大津英揮、水川哲徳
(中列左から) 神谷道代、小泉武昭、枝連一志、小林克彰、藤原哲晶
(前列左から) 日野貴美、和田 亨、田中晃二、川口博之、松尾 司、小室貴士

2. 生体内触媒や工業触媒には特異な反応を行う異核金属カルコゲニド化合物が存在することが知られている。これらの化合物を指標化合物とし、新しい機能をもつ異核金属カルコゲニドクラスタの創製を行う。

配位結合研究部門 (客員研究部門)

錯体化学実験施設の他部門と協力しながら、配位結合を有する超分子錯体の合成と物性について研究する。また、多核金属錯体や金属-金属結合を有する金属クラスターの合成も行い、X線結晶構造解析、NMR、IRを含めた各種分光測定により構造を明らかにする。また、それらの光および磁気物性あるいは触媒活性と分子構造との相関を解明する。

電子計算機室

平成12年4月、分子科学研究所電子計算機センターが機構共通施設に改組転換されたことに伴い、電子計算機室が設置された。電子計算機室で行っている主な所内情報処理サービスは以下の通りである。PPP接続による所外からのダイヤルアップ・サービス、メーリングリスト発行サービス、ネットワーク定時時刻提供（NTP）サービス。また電子計算機室が開発したプログラムを用いたWebインターフェイスによる分子科学研究所スケジュール管理表、分子科学研究所職員アドレス帳など、

ネットワーク委員会、広報委員会と協力して所内の情報化に取り組んでいる。その他、所内用の量子化学文献検索システム（QCLDB）の運用、電子状態可視化プログラムの開発等、分子科学計算関係の研究開発業務を分子科学研究所電子計算機センター時代から引き続き行っている。Webインターフェイスによるスケジュール管理表、職員アドレス帳プログラムは、機構内の管理局、生理学研究所、基礎生物学研究所セミナースケジュール等にも広く利用されている。更に、所内分子物質開発研究センターおよび分子制御レーザー開発研究センターからの依頼を受け、機器予約システム（MARS）の開発を行い、管理局からの依頼を受け、岡崎コンファレンスセンター予約状況表、ロジック予約状況検索プログラム、構内入構許可証申請プログラムなどを開発するなど、情報処理サービスの基幹プログラムの開発も行ってきた。

研究グループにおける主な研究内容は、計算機シミュレーションと化学反応動力学計算である。このうち前者では、量子化された系のシミュレーションとして、溶液中における溶質の分子振動量子動力学について影響汎関数理論、量子古典混合系近似などによる解析を行い、また量子液体とそこでの溶質の溶媒和について経路積分法による計算を行っている。さらに、複雑な古典凝縮系のシミュレーションとして、生体膜やポリペプチド、そして超臨界流体などに対しても分子動力学法による計算を行っている。一方後者では、分子軌道計算に基づく電子状態ポテンシャルエネルギー面の高精度計算と、得られたポテンシャル面上での反応動力学の研究を行っており、特に高振動励起状態の解析や単分子解離反応におけるエネルギー再分配過程などの研究に力をいれている。また、電子相関効果を充分に取り入れた多配置SCF計算と分子動力学計算を同時に行うためのプログラムを開発している。これを用いて、高精度の非経験的分子軌道計算によるポテンシャル曲面を解析関数として得ることが困難な、表面反応や生体関連分子の反応機構の解析に応用している。



（後列左から）手島史綱、西本史雄、高見利也、平田文男、岡崎 進
（前列左から）南野 智、内藤茂樹、水谷文保、南部伸孝

機構共通研究施設（分子科学研究所関連）

統合バイオサイエンスセンター

本組織は、分子科学、基礎生物科学、生理科学の学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な問題意識と方法論を適用、駆使することによって、新しいバイオサイエンスを切り開く事を目的として設立された機構共通の研究センターで、生物諸科学、医科学のみならず、化学、物理学をも内包する研究課題をとり上げていく事が期待されている。岡崎の3研究所と連帯を密にしながら、人事交流も含めた研究展開をはかり、研究課題は5年毎に見直すことになっている。

本センターの研究は、生命現象の基本に関する諸問題を分レベルから細胞、組織レベルまで統合的に捉える基礎研究を中心にする。具体的には、発生、分化、再生等の時系列的に沿った生命現象、情報の発生、伝達、応答など生体分子の構造と機能の解明を図る戦略的方法論、生体を取り巻く環境因子とその応答など生命環境に関する諸問題、を各々中心課題とする3つの研究領域を置く。一研究領域は3人の専任教授と2～3人の助教授から成り、生命環境研究領域のみ客員教授と助教授が1人ずつついている。

センター長は平成13年4月から2年間、永山國昭教授（生理学研究所兼務）が務められる。分子科学研究所からは、戦略的方法論研究領域に木下一彦教授、青野重利教授、藤井浩助教授、生命環境研究領域に北川禎三教授、そして客員研究部門に名古屋大学大学院理学研究科の倭剛久助教授が加わっている。

戦略的方法論研究領域

1. [分子生理グループ]

たんぱく質（あるいはRNA）の分子はたった1個で見事な機能を発揮するので、分子機械と呼ばれる。我々の目標は、生体分子機械の働く仕組みを探ることである。このために、光学顕微鏡の下で、分子機械1個1個が働く様子を直接観察し、さらに光ピンセットや磁気ピンセットといった道具を使って分子をつまんだり引っ張ったりする。すでに、回転モーター分子やリニアモーター分子など、分子モーターと呼ばれる分子機械の仕組みが分かりはじめてきている。



（後列左から）足立健吾、Md Yusuf Ali、深津美紀子、下理恵子、塩育
（前列左から）余語克紀、榊直由、牧泰史、木下一彦

2. 新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能の解明 [生物無機グループ]

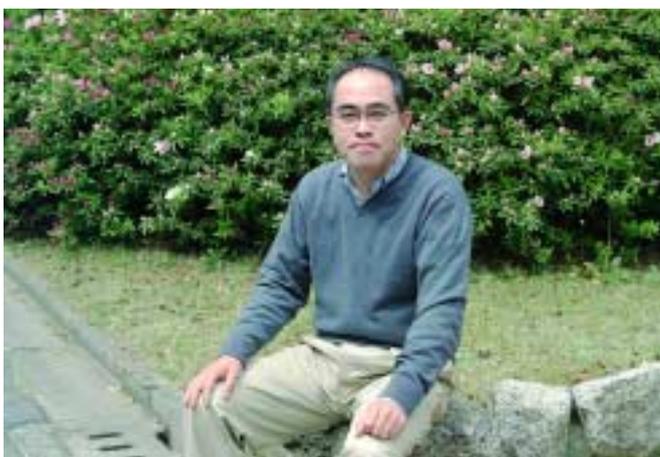
近年、酸素、一酸化炭素等の気体分子が、生体系においてシグナル分子として機能することが分かり、注目を集めている。当研究グループでは、これらの気体分子が、生理的なシグナル分子として機能する場合に必要な不可欠なレセプター（センサー）タンパク質を対象に、研究を進めている。分子生物学的、および物理化学的な実験手法を駆使することにより、酸素センサータンパク質（HemAT）、および一酸化炭素センサータンパク質（CooA）による酸素、一酸化炭素センシング機構、シグナル伝達機構を明らかにし、それらの構造機能相関の解明を行なう。



青野重利

3. [生体物理グループ]

金属酵素がもつ構造の規則性と機能の関わりを、活性中心モデル錯体の電子構造やタンパク質の作る反応場の特色から研究している。さらにその成果を基に、既知の金属酵素の機能改質や人工酵素、機能性触媒などの新規物質の開発を進めている。



藤井 浩

生命環境研究領域

[生体分子グループ]

生体分子の構造と機能の相関を主に振動分光学の手法を用いて研究している。ピコ秒の時間分解能で蛋白質の動的構造を論じる研究や、酵素反応中間体の検出による反応メカニズムの議論まで生体分子科学を広くカバーしている。



(後列左から)二宮朱美、内田 毅、奥野大地、長野恭朋、太田雄大
(前列左から)平松弘嗣、長友重紀、北川禎三、佐藤 亮、PAL, Biswajit

計算科学研究センター

本センターは我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターとしての経験を活かし、これまでの分子科学計算に加えて分子科学-生物科学の境界領域に展開を図る目的で昨年度発足した機構共通施設である。

本センターの前身である分子科学研究所電子計算機センターは国内における分子科学者の共同利用施設として1977年に設立され、一方では国際的にもピークをなす計算を行い、他方では国内の計算化学全体の底上げを行うという二重の役割を果たしてきた。

まだ、ワークステーションが普及していなかった時期に地方の大学などで計算機にアクセスできなかった研究者に計算資源を提供し、その中から国際的にも高い評価を受けている分子科学のリーダーを数多く輩出してきた。現在、世界で発表されている量子化学関連論文全体の2, 3パーセントが旧「分子研電算センター」を使って行われたものである。旧分子研電算センターは分子研「電子計算機室」に改組され、そのスタッフは計算科学研究センターも兼務し、その中核としてセンターのハードウェア・ソフトウェアの維持・管理、共同利用者へのサービス業務、マシンの更新・導入などの業務に携わっている。

現在、センターにおいて稼動している主なコンピュータは(1) Fujitsu VPP5000 (30 PE; 総理論演算性能, 288 GFLOPS; 総主記憶容量, 256 GB), (2) SGI Origin2800 (192 CPU; 総理論演算性能, 115 GFLOPS; 総主記憶容量, 192 GB), Origin3800 (128 CPU; 最高演算性能, 102 GFLOPS; 総主記憶容量, 128 GB) および (3) NEC SX-5 (最高演算性能, 32 FLOPS; 主記憶容量, 32 GB) であり、その他にIBM SP2, NEC TX7, COMPAQ AlphaServer, NEC HPCなどの中型ないし小型のマシンが全国のユーザーのサービスに提供されている。また、機構内の生物関連分野の高速シミュレーション計算を主な対象としたHITACH SR8000F1も稼動している。

現在、センターは共同利用施設として分子科学分野を中心に機構内外の約150グループ以上、700名弱のユーザーにサービスを提供しており、文字どおり我が国における理論分子科学分野の計算センターであるが、最近、その環境に変化が生まれつつある。以前、センターの重要な機能のひとつはコンピュータにアクセスできない多くの研究者に計算機資源を提供することであった。しかしながら、ワークステーションの急速な普及によって、通常の計算は自前のワークステーションで行うことができるようになり、大型計算センターとしての位置づけは、むしろ、ワークステーションでは処理が困難であるような大規模計算を可能とする点に比重が移りつつある。このような計算機環境の変化を考慮して、計算科学研究センターでは通常の利用申請の他に「特別利用申請」枠を設け、少数(年間10件程度)の特別プロジェクトの募集を行っている。

計算科学研究センターを巡るもうひとつの重要な変化は生物関連の計算・情報処理に関する要求の増大である。センターでは、当面、分子科学-生物科学の境界領域における分野への展開を図り、同時に、より広い生物分野に守備範囲を拡大するための条件づくりをハード、ソフト、およびスタッフの面で進めようとしている。



(後列左から)真木 淳、南野 智、高見利也、水谷文保、内山郁夫、三上泰治、西本史雄、内藤茂樹、手島史綱
(前列左から)南部伸孝、平田文男、岡崎 進、田中純志

技術課

わが国が「科学技術創造立国」を目指し、科学技術の振興を強力に推し進めるため、平成7年に科学技術基本法が制定された。これに基づき、平成8年に科学技術基本計画が閣議で決定されたが、ここには基礎研究の重要性とその研究を支援するための組織の充実が強く述べられている。

分子科学研究所は、物質の根源を探究することを使命とし、その基礎研究を行う研究所として昭和50年に創設された。同時に技術的研究支援を目的として、技官を組織化した技術課が発足した。

技術課は、所長に直属した組織として、6付属研究施設及び6研究系に配属された技官によって、構成されている。その役割は、各人の持っている専門的技術によって、研究活動を支援することにある。さらに、研究のしやすい環境をつくること、つまり、研究者が研究に専念できるように、ネットワークの運用管理、建物、設備、共通実験機器等の維持管理、そして、安全に関わる業務や、多数の見学者への対応等、研究所共通にかかわる業務も、研究支援のための重要な業務として行っている。また、技術課の組織を生かして、各研究施設や研究系に配属されている技官からメンバーを選び、プロジェクトチームを結成し、研究所の緊急課題に対応している。

技官は、高度化する技術に対応するために、常にその向上を目指して精進しなければならない。外部技術者との交流は、技術向上のためには不可欠である。技術課は発足時より、外部技術者との技術交流を目的とした、技術研究会を開催している。現在これは、全国的な広がりを見せ、大学、研究所の技官の技術向上に大いに役立っている。また、平成7年度からは、新しい試みとして、他大学、研究所の技官を一定期間、分子科学研究所の付属研究施設に受け入れて、技術研修を行っている。この試みは、派遣側、受け入れ側双方の技官の活性化に繋がり非常に好評である。将来的には正式に制度化して定着をはかりたい。

以上のように、技術課は各人の持っている専門的技術によって研究を支援するだけでなく、研究のしやすい環境を作ることを最大の使命と考え活動している。また、技官自身の技術向上のために、技術研究会、技術研修等自己研鑽も積極的に行っている。これらの活動は技術課の活動報告誌「かなえ」に掲載されている。



(前列中央より)酒井楠雄、大原恭子、永園尚代、佐藤敦子、中村理枝、鶴田由美子
他の人は各研究部門、付属施設の欄参照

大型研究設備

フェムト秒・ピコ秒化学反応観測システム

極短パルスレーザー技術の進歩により、超高速分光法が、物理や化学の分野における一般的な手法になりつつある。しかし用いる試料や手法に応じて、必要となるレーザー光の波長およびパルス幅などが異なる場合が多く、一つのレーザーシステムにおいて、波長やパルス幅を任意に選択することができれば、応用範囲が急速に広がることは間違いない。そこで今回、(1) 1 kHzの繰り返し周波数で1 μJ以上の強度を保ち、(2) 紫外から赤外まで二色で連続波長可変であり、(3) ピコ秒レーザーとフェムト秒レーザーとが同期する、新しいレーザーシステムを導入した。

図1にレーザーシステムのブロック図を示す。新システムでは、2台のフェムト秒モード同期チタンサファイアレーザー（ML Ti:Sapphire）間のジッターを位相制御し、それぞれピコ秒およびフェムト秒のチタンサファイア再生増幅器（RGA）のシード光としている。ピコ秒RGAからの出力は、波長790 nm、パルス幅約4 ps、パルスエネルギー約3 mJ、フェムト秒RGAからの出力は、波長800 nm、パルス幅約200 fs、パルスエネルギー約2 mJであった。繰り返しはともに1 kHz、RGA間でのジッターは約4 psである。フェムト秒RGAは、加段増幅することにより、約10 mJのフェムト秒パルスの発生も可能である。ピコ秒RGAからの出力光を二つに分け、光パラメトリック発生・増幅システム（OPA）の励起光源として各々用いた。フェムト秒RGAからの出力光も二つに分け、片方はOPAの励起光源に、もう片方は2倍波から4倍波までの高調波発生に用いている。ピコ秒OPAの波長域は、図2に示すように和周波や差周波と組み合わせることにより、片方が230–11200 nm、もう片方が189–2700 nmまで、これら全領域において1 μJ以上の強度を保ったまま連続波長可変である。本装置を用いて、液体中に存在する中性およびイオンクラスターの光解離、再配向および余剰エネルギーの散逸過程のダイナミクスの研究が現在行われている。分子線装置と結合させて気相中の化学反応過程を観測する実験も可能である。

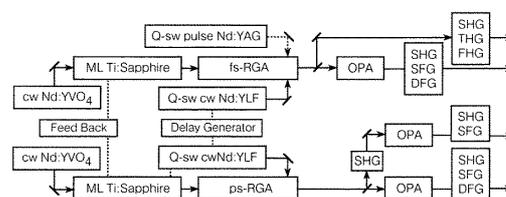


図1 ブロック図

cw Nd:YVO₄, ダイオード励起 cw Nd:YVO₄ レーザー; ML Ti:Sapphire, フェムト秒モード同期チタンサファイアレーザー; Q-sw cw Nd:YLF, Q-スイッチ cw Nd:YLF レーザー; Q-sw pulse Nd:YAG, Q-スイッチパルスNd:YAG レーザー; fs-RGA, フェムト秒再生増幅器; ps-RGA, ピコ秒再生増幅器; OPA, パラメトリック増幅器; SHG, 第二高調波発生; THG, 第三高調波発生; FHG, 第四高調波発生; SFG, 和周波発生; DFG, 差周波発生

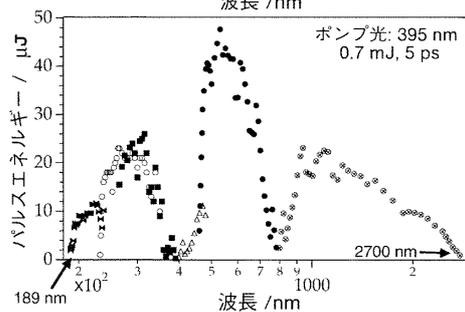
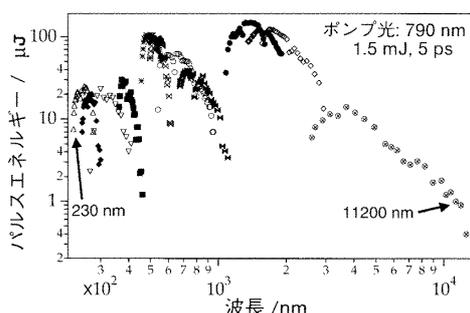
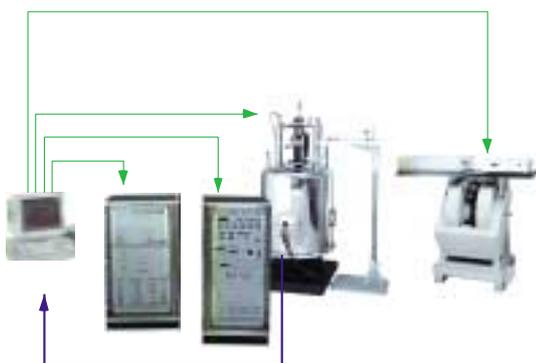
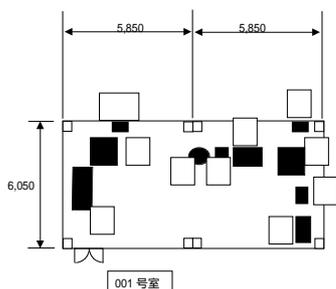


図2 ピコ秒OPAの波長域
基本波励起(上)
二倍波励起(下)

W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置



High-Frequency / High-Field Pulsed ESR (Bruker E680)



分子物質開発センター内極低温棟001号室平面図

Wバンド FT ESR 装置 Wバンド超伝導磁石 Wバンドマイクロ波ブリッジ 分光観測・制御ユニット 観測・制御用ワークステーション パルスXバンド電磁石 電磁石電源・冷却水循環装置 液体窒素自動供給装置
Xバンド CW ESR 装置 CW・Xバンド電磁石 CW・Xバンド分光器 電磁石電源・冷却水循環装置

Xバンド CW ESR 装置一式 (Qバンド測定アタッチメント付)

- 1) 電磁石及び電源
電磁石直径: 10 インチ (25 センチ)
最大磁場: 1.48 T
- 2) 分光計
 - a. Xバンドマイクロ波ブリッジ
発振周波数: 9.2 ~ 9.9 GHz
出力: 最大 400 mW (ガン発振器)
 - b. Qバンドマイクロ波ブリッジ
発振周波数: 34 GHz
出力: 最大 80 mW (ガン発振器)
- 3) 共振器
 - a. Xバンド用矩形型標準キャビティ
共振モード: TE102
光透過率: 50%
最大サンプル径: 10 mm
Q値: 6000 以上 (無負荷時)
 - b. Qバンド用円筒型標準キャビティ
共振モード: TE011
最大サンプル径: 2 mm 又は 3 mm
Q値: 12000 以上 (無負荷時)
- 4) 極低温温度可変装置
温度範囲: 1.9 K から室温
制御精度: ± 0.1 K

本研究所は、材料科学分野における最先端・学術研究のセンター的役割を担っている。これまで有機超伝導体や金属クラスターなど多くの高機能分子素子を生み出してきた。最近炭素クラスター・フラーレンの出現、超伝導体の種類の多様化など、分子素子材料の新しい時代を迎えている。また、生体関連分子・金属錯体のクラスターや生体無機分子の研究などが急速に進みつつある。新物質の出現・生体関連分子への注目と時を合わせるように、電子スピン共鳴測定装置に関する方法論にも新時代が到来している。つまりパルス・フーリエ変換測定法を駆使し2次元表示する二次元パルス ESR 法と高磁場・高周波数マイクロ波 ESR 法である。方法論の革命は、新分子素子や生体関連分子の電子物性測定研究に質的变化を与える。

平成 10 年度補正予算により W-band (95 GHz) パルス電子スピン共鳴測定装置が導入され、全国大学間共同利用機器として分子物質開発センター内極低温棟 001 号室に設置された。ESR 設備全体の構成を以下に示す。

Wバンド FT ESR 装置一式 (Xバンド FT ESR 装置、並びにパルス ENDOR 装置付)

- 1) Wバンド 基本性能
測定領域: 93.6 ~ 94.4 GHz
測定感度: 2×10^7 spins/GHz
- 2) Wバンド 共振器
共振器モード: TE011
共振器チューニング幅: 10 GHz
共振器バンド幅: 40 MHz
共振器 Q 値: 2400 (室温, 無負荷時)
- 3) Wバンド用超伝導磁石
主磁石 (超伝導) 掃引範囲: 0 ~ 6 T
補助磁石 (室温) 掃引範囲: 0 ~ 70 mT
- 4) Xバンド測定部
電磁石直径: 10 インチ (25 センチ)
最大磁場: 1.48 T
- 5) FT 用共振器
形式: ダイエレクトリック
最大試料管径: 5 mm
- 6) パルス ENDOR / 三重共振装置
アンプ出力: 200 W 以上
周波数範囲: 0.3 ~ 150 MHz
- 7) 極低温温度可変装置
Xバンド FT: 4.2 K から室温 (精度 ± 0.1 K)
Wバンド FT / CW: 4.2 K から室温 (精度 ± 0.1 K)

極端紫外光実験設備

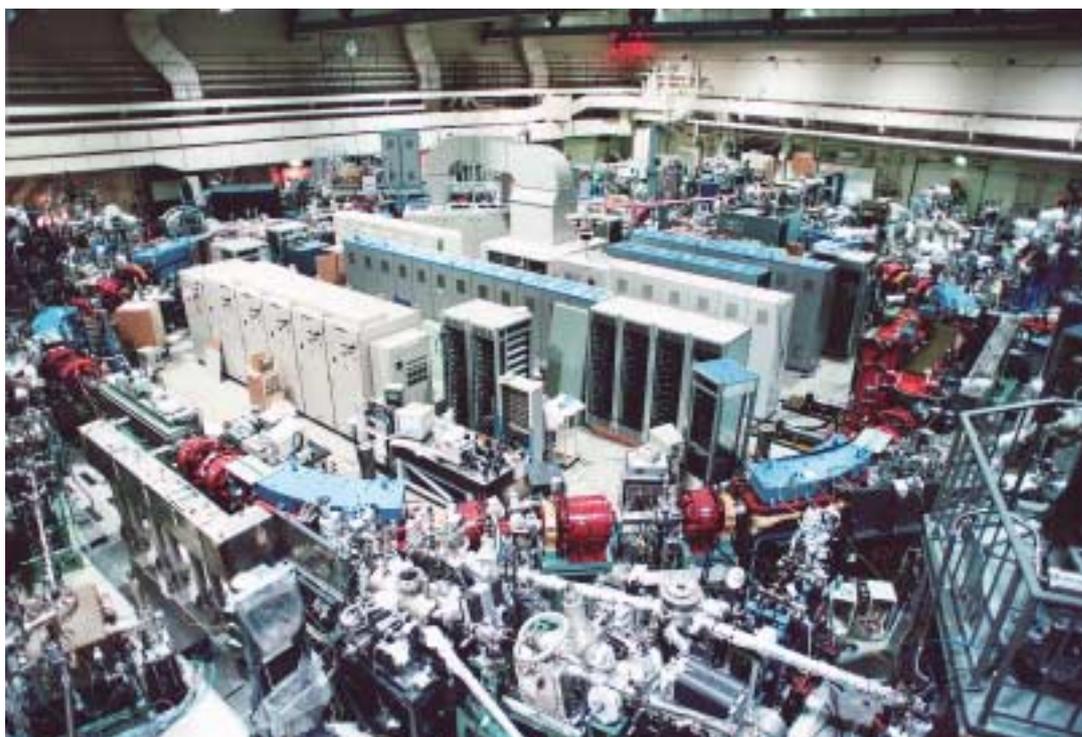
高速で運動する電子はシンクロトロン放射（SR）と呼ばれる光を円軌道の接線方向に放出する。このSRは極端紫外からX線にわたる領域での理想的な光であり、分子科学の重要な研究手段の一つである。昭和55年度から観測システムの製作が、昭和56年度から光源加速器本体の建設が始まり、昭和57年度から極端紫外光実験施設が発足し、58年11月に試運転に成功した。59年9月から所内外の施設利用実験を開始し、数多くの研究が進行している。

この極端紫外光源（ニックネーム、UVSOR）本体は、750 MeVの電子ストレージング（最高貯蔵電流、500 mA）であり、その入射器は15 MeVの線型加速器を前段加速器とする600 MeVのシンクロトロンである。通常の偏向部では数 mまでの極端紫外光が利用できる。アンジュレータと呼ばれる挿入光源を直線部に挿入したビームラインでは、波長可変で、より高輝度の準単色光を利用することができる。研究の対象は気相及び凝縮相であり、主として次の7つの分野に力点を置いている。

分光、光電子分光、光化学、化学反応素過程、固体・表面光化学、光励起新物質合成、顕微分光実験。

現在建設、改造中のものも含めて20本のビームライン（観測システム）が存在する。保有している分光器は、1 m瀬谷波岡型分光器2台、平面回折格子分光器3台、3 m直入射分光器2台、2.2 m定偏角斜入射分光器1台、2 mガラスホッパー型斜入射分光器1台、15 m定偏角斜入射分光器1台、直入射斜入射複合型分光器1台、結晶分光器1台、赤外干渉計2台及びマーチン・パブレット型遠赤外干渉計1台、ドラゴン型斜入射分光器1台、多層膜分光器1台、不等刻線間隔平面回折格子分光器1台である。

ストレージングの電子ビームを用いて自由電子レーザー（FEL）の研究も行い、平成4年3月に紫色の光発振に成功後、平成8年9月に円偏光オプティカルクライストロン利用による短波長発振を世界に先駆けて行うなどの成果を挙げ、平成13年度にはFELと放射光を組み合わせた気相での二色実験に世界で初めて成功した。



COEコンファレンス

平成13年度分子科学研究所COE国際シンポジウム

Reactions in Aqueous Media (水中での化学反応)

開催日 2001年10月2日～3日
提案代表者 分子科学研究所 魚住泰広

有機分子の重要性は言を待たない。その多くは従来有機溶剤中で取り扱われてきた。水中での分子変換は、生命現象ではむしろ当たり前の事象でありながら、試験官の中での検討はほとんど行われていない。水中での有機分子の取り扱い：合成、変換、機能、理論、分析、物性、は基礎化学的にも極めてホットなトピックスである。また近年の環境調和型次世代化学プロセスを考慮するならば応用化学的にも大きな課題である。本シンポジウムは「水中化学反応」というこの新しい課題領域を多角的に概観するとともに、多様な研究領域の異なる視点を通して「水」という反応メディアを捉え、その周辺化学への理解を深め、新たな課題を掘り起こすことを目的として提案された。2日間に14の国内外からの招待講演、約150名の参加者を得て、精力的に活発な議論がなされた。有機、無機、理論、クラスター、など多岐にわたる領域を越え、「水」に焦点をあてて世界の先端を切り拓く研究者が一堂に会したことは従来にない好機会であり、参加者にとっても示唆に富む内容ではなかったかと自負している。

以下に招待講演の演者、所属、演題をあげる。活発に討論いただいた参加者の皆様、ならびに本研究所平田文男、藤井正明、渡辺芳人教授をはじめご協力いただいた各位にこの場を借りて深謝したい。

Prof. Chao-Jun Li (Tulane University)

Developing catalytic reactions in air and water

Prof. David E. Bergbreiter (Texas A & M University)

Designing New Recoverable/Reusable Catalysts Using Polymer Supports

Prof. Fumio Hirata (IMS)

Molecular Theory for Solvent Effect on Organic Reactions in Aqueous Environment

Prof. Georg Suess-Fink (Institute de Chimie, Universite de Neuchatel)

Catalytic Functionalization of Methane in Aqueous Solution

Prof. Iwao Ohmine (Nagoya University)

Water Dynamics; Fluctuations and Reactions

Prof. Jiali Gao (University of Minnesota)

Dynamics, Pathways, and Tunneling in Enzymatic Reactions

Prof. Koichi Ohe (Kyoto University)

Transition Metal-Catalyzed Enantioselective Reactions in Water Using Water-Soluble Chiral Ligands Derived from Natural Sugars

Prof. Koichiro Oshima (Kyoto University)

Radical Reaction in Water

Prof. Makoto Fujita (Nagoya University)

Chemical Transformations within Aqueous Coordination Nanocages

Prof. Masaaki Fujii (IMS)

Structure and Dynamics of Phenol/Naphthol Aqueous Cluster Studied by Laser Spectroscopy

Prof. Seiji Ogo (IMS)

pH-Dependent Activation Cycle of Dihydrogen

Prof. Shu Kobayashi (Tokyo University)

New Dimensions of Organic Transformations in Water

Prof. Timothy S. Zwier (Purdue University)

Molecular Clusters as Probes of Solvent Effects: The influence of water on the conformational preferences of flexible molecules

Prof. Yasuhiro Uozumi (IMS)

Palladium Catalysis in Water

共同研究

大学共同利用機関の重要な機能として、所外の分子科学及び関連分野の研究者との共同研究を積極的に推進している。そのために共同研究者宿泊施設を用意し、運営協議員会で採択されたテーマには、旅費及び校費の一部を支給する。次の6つのカテゴリーに分類して実施している。(公募は前期・後期(年2回)、関係機関に送付。)

1. 課題研究 : 数名の研究者により特定の課題について行う研究で3年間にまたがることも可能。
2. 協力研究 : 所内の教授又は助教授と協力して行う研究。(原則として1対1による。)(平成11年度後期よりUVSOR協力研究は、協力研究に一本化された)
3. 研究会 : 分子科学の研究に関連した特定の課題について、所内外の研究者によって企画される研究討論集会。
4. 施設利用 : 研究施設に設置された機器の個別的利用。
5. UVSOR課題研究 : 数名の研究者又は複数の研究グループによる開発的な研究で、1年あるいはそれ以上にわたるもの。
6. UVSOR施設利用 : 原則として共同利用の観測システムを使用する研究。

平成13年度

課題研究

課題名	提案代表者名
フェムト秒時間分解光電子分光による化学反応の研究	鈴木 俊法(分子研)
光誘起相転移材料・磁性材料の開発	速水 真也(九大院理)
アクリジン・ポルフィリン連結分子の合成と光物理化学特性	田中 康隆(静大工)
高速時間分解分光による孤立分子および分子集合体のフォトクロミック機構の解明	関谷 博(九大院理)
多自由度複雑系で有効な拡張アンサンブル法の開発	岡本 祐幸(分子研)
フラレンを用いた磁性超分子の構築と磁性発現の解明	加藤 立久(分子研)
不斉分子磁性体の磁気異方性、Magnetic Viscosityに関する研究	井上 克也(分子研)

協力研究

「ヒト副甲状腺ホルモンの溶液内構造のエネルギー計算」を始め100件

研究会

研究会名	提案代表者
イオン液体の分子科学	浜口 宏夫(東大院理)
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	渋谷 一彦(東工大院理)
分子科学から見た21世紀の溶液化学	佐藤 啓文(分子研)
タンパク分子の機能を担うメカニズムの研究はどのような「普遍性」を持ち得るか	森本 英樹(阪大院基礎工)
走査プローブ顕微鏡を用いた分子科学研究の新展開	小宮山政晴(分子研)
原子分子の価電子素過程ダイナミクス	河内 宣之(東工大院理)

施設利用

1. 機器利用

「半導体薄膜及び絶縁体薄膜の評価」を始め49件

2. 計算機利用

「蛋白質の立体構造の変化と運動」を始め144件

UVSOR施設利用

「バリウム弗化ハライドにおけるシンチレーション特性」を始め157件

国際共同研究

日韓共同研究

分子科学研究所と韓国高等科学技術院（KAIST）の協力で、1984年以来、日韓合同シンポジウムと韓国研究者の分子科学研究所への受け入れの二事業が行われている。

合同シンポジウムは1984年5月に分子科学研究所において第1回シンポジウムを行い以後2年毎に日韓交互で開催しており、1999年1月韓国のテジョン（Taejon）市で開いた第8回シンポジウムに引き続き、第9回シンポジウム「気相、凝縮相および生体系中の光化学過程：実験と理論の協力的展開」を2001年1月分子科学研究所において開催した。次回の会議は2002年度中に韓国で開催される予定であり、現在、韓国側で準備を進めている。

なお、1991年度から毎年3名の韓国側研究者を4か月ずつ招聘しており、2000年度も3名の招聘を実施した。

日中共同研究

日中共同研究は、1973年以来相互の研究交流を経て、1977年の分子科学研究所と中国科学院科学研究所の間での研究者交流で具体的に始まった。両研究所間の協議に基づき、共同研究分野として、(1)有機固体化学、(2)化学反応動力学、(3)レーザー化学、(4)量子化学をとりあげ、合同シンポジウムと研究者交流を実施している。特に有機固体化学では1983年に第1回の合同シンポジウム（北京）以来3年ごとに合同シンポジウムを開催してきた。1995年10月の第5回日中シンポジウム（杭州）では日本から20名が参加し、引き続いて1998年10月22日 - 25日に第6回の合同シンポジウムを岡崎コンファレンスセンターで開催した。中国からは若手研究者10名をふくむ34名が、日本からは80名が参加し、盛況のうちに終了した。第7回は2001年11月19日 - 23日に広州の華南理工大学で開催され、日本からは井口洋夫教授や白川英樹教授をふくむ26名が参加し、中国からは90名が参加した。

日本・チェコ共同研究

1995年度から開始されたプログラムで、チェコ科学アカデミー物理化学研究所（ヘイロフスキー研究所）、同高分子科学研究所、カレル大学、プラハ工科大学などとの共同研究を促進させる事を目的としている。初年度は文部省科研費（海外学術研究）の支援により、分子研・所長はじめ6人がプラハを訪問し、共同研究の推進について討論を行った。また、チェコの若手研究者1人が約3ヶ月間分子研において共同研究を行なった。1996年度は2人をプラハに派遣し、4人を受け入れて共同研究を実施した。1997年度からは日本学術振興会の2国間共同研究として、日本側は北川禎三が代表となり申請、受理された。1997年度は2人を派遣し、6人を受け入れた。1998年度は4人を派遣し、6人を受け入れた。1999年6月にはプラハのアカデミーハウスで3日間の合同セミナーを実施し、分子研・所長をはじめ、分子研から5人、所外から3人が参加した。これ以外に1999年には2人を派遣し、1人を受け入れた。1999年8月から2001年3月まで中村宏樹が日本側代表者となり、延べ8人を派遣し、9人を受け入れた。2001年3月には岡崎コンファレンスセンターにおいて合同セミナーを開催し、チェコからは若手研究者を含む8名が参加し、日本からは13名（所内5名、所外8名）が参加した。

総合研究大学院大学

総合研究大学院大学は昭和63年10月1日に発足し、初代学長に長倉三郎岡崎国立共同研究機構長が就任した。更に平成2年1月廣田栄治教授が同大学副学長に就任した。その後、平成7年3月に長倉学長が任期満了により退官され、同年4月に廣田栄治同大学副学長が第二代学長に就任し、森脇和郎同大学名誉教授が副学長に就任した。そして平成13年4月には小平桂一前国立天文台長が第三代学長に、高畑尚之同大学先導科学研究科長が副学長に就任した。分子科学研究所は、同大学院大学の基盤機関として、構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻を受け持ち、平成12年度までに166名（外国人21名、編入者2名を含む）の学生を受け入れ、さらに平成13年4月には、10大学から12名の学生を新たに受け入れた。また平成3年3月に6名の第一回博士課程後期修了者を送り出してから、これまでに114名の修了者を送り出した。

その専攻の概要は次の通りである。

構造分子科学専攻

詳細な構造解析から導かれる分子及び分子集合体の実像から物質の静的・動的性質を明らかにすることを目的として教育・研究を一体的に行う。従来の分光学的及び理論的な種々の構造解析法に加え、新しい動的構造の検出法や解析法を用いる総合的構造分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

機能分子科学専攻

物質の持つ多種多様な機能に関して主として原子・分子レベルでその発現機構を明らかにし、さらに分子及び分子集合体の新しい機能の設計、創製を行うことを目的として教育・研究を一体的に行う。新規な機能測定法や理論的解析法の開発を含む機能分子科学の教育・研究指導を積極的に推進する。

分子科学研究所は発足当初より大学院教育に協力して学生の研究指導を行う制度（次頁参照）を持ち、この制度にもとづいて特別共同利用研究員（平成13年度前期24名）を受け入れている。

分子科学研究所としては、この両制度の調和のとれた発展を図りつつ、研究所が持つ独自の大学院制度の確立をめざしている。

大学院教育協力

分子科学研究所は、大学共同利用機関として、広く分子科学に関する共同利用に供されるとともに、研究者の養成に関しては、国・公・私立大学の要請に応じて、「特別研究学生」を受け入れ、大学院における教育に協力を行ってきたが、近年における、研究所の研究活動への大学院学生の参画の重要性に鑑み、平成9年度からは当該大学院学生を「特別共同利用研究員」として受け入れ、併せて研究指導を行い大学院教育の協力をを行うこととした。

特別共同利用研究員（平成3年度までは受託大学院学生，平成4年度から平成8年度までは特別研究学生）受入状況（年度別）

所 属	昭52~平4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
北海道大学	10										
室蘭工業大学	2										
東北大学	9		2				1	1			
山形大学							6				
筑波大学							1		1		
宇都宮大学											2
群馬大学			1								
埼玉大学	2										
千葉大学						1	1	1		1	1
東京大学	27	1			1	1	1				
東京工業大学	15		2	3	4						4
お茶の水女子大学	5	1									
横浜国立大学	1										
金沢大学	3				3	3			1	1	
新潟大学	3	1									
福井大学	2			1	1		1	1	2		
信州大学	1	1				1				1	
岐阜大学		1	1								
名古屋大学	53	2	2	1	3	3	3	1	2	5	2
名古屋工業大学	6						1	4	3	1	
豊橋技術科学大学	30										
三重大学					2	2	2	1			
京都大学	10	7	5	4	4	2	2	1	2	1	1
京都工芸繊維大学	6										
大阪大学	23	1							1	1	
神戸大学						1	1	1	1		1
奈良教育大学		1									
奈良女子大学	1		1	1	1						
岡山大学			7	2	1	1				2	1
広島大学	17	1	7	6	1			1	1		2
山口大学	1										
島根大学											1
愛媛大学	3										
高知大学	2										
九州大学	32	1			1	2	1	1	2	2	1
佐賀大学	3	4	5	1							
熊本大学	4	2									
宮崎大学								2	4		
琉球大学							1				
東京都立大学	17									3	
名古屋市立大学									4		
大阪府立大学											1
大阪市立大学	3							1			
姫路工業大学										1	
学習院大学						1					
北里大学					1	1					
慶應義塾大学	4					1	1			2	1
上智大学	1										
東京理科大学							1	1		1	
東海大学	1										
東邦大学					1				1	1	
星薬科大学	1										
早稲田大学	1				1	5	2			1	1
名城大学						2	2				
計	299	24	33	19	25	27	28	17	25	24	19

国際交流

海外からの研究者（平成13年度）

1. 評議員

BRADSHAW, Alexander M.	ドイツ	マックスプランク・プラズマ物理学研究所長	13.10.20-13.10.25
LINEBERGER, William Carl	アメリカ	コロラド大学教授	13.12. 1-13.12. 8

2. 外国人客員研究部門

MO, Yu-Jun	中国	河南大学教授	12. 5. 2-13. 5. 1
GRITSENKO, Viktor	ロシア	ロシア科学アカデミー化学物理研究所研究員	12. 6.16-13. 6.14
SKODJE, Rex T.	アメリカ	コロラド大学教授	13. 4. 4-13.12.31
DELANGÉ, Cornelis Andreas	オランダ	アムステルダム大学教授	13. 5. 2-13. 8. 1
WANG, Changshun	中国	河南大学教授	13. 6. 1-14. 3.31
DU, Si-de	中国	Fudan 大学助教授	13. 6.15-14. 3.31
SWIETLIK, Roman	ポーランド	分子物理学研究所教授	13. 8. 2-14. 2. 1
GU, Ning	中国	東南大学化学医工学科教授ナノスケール科学技術センター長	14. 1.29-14. 7.28
CARRAVETTA, Vincenzo	イタリア	国立量子化学・分子エネルギー学研究所上級研究員	14. 2.11-14. 8.10

3. 文部省招へい外国人研究員

HUDECEK, Jiri	チェコ	Charles University 助教授	13. 4. 1-14. 3.15
LI, Zheng-Qiang	中国	吉林大学準教授	12. 5.23-13. 5.22
ZHANG, Bin	中国	中国科学院化学研究所固体有機研究室助教授	13. 6. 2-14. 5.31
JANG, Won Kweon	韓国	ハンセオ国立大学助教授	13. 6.16-13. 7.31 13.12.11-14. 2.21
LEE, Eok kyun	韓国	KAIST 教授	13. 6.25-13. 8.24 14. 1. 1-14. 2.28
LEE, Chun-Woo	韓国	アジュー大学準教授	13. 7.11-13. 8.27 13.12.17-14. 3. 1
HOLOVKO, Myroslav F.	ウクライナ	ウクライナ科学アカデミー教授	13.12.11-14. 3.10

4. 日本学術振興会招へい外国人研究者

BIAN, Wensheng	中国	山東大学理論化学研究所助教授	12. 2. 1-14. 1.31
HOCKE, Heiko	ドイツ	パーゼル大学博士研究員	12. 9. 1-14. 8.31
MANDAL, Debabrata	インド	エス.エイ.ジャイプリア大学講師	12.11.27-14.11.26
OSHEROV, Vladimir I.	ロシア	ロシア科学アカデミー化学物理研究所教授	13. 4. 1-13. 5.30
GOSSE, Charlie	フランス	パリ第6大学教務助手	13. 4. 1-13. 9.28
ALI, Md. Yusuf	バングラデシュ	(豊橋技術科学大学大学院工学研究科博士課程修了)	13. 4. 1-14. 3.31
CHAMPION, Paul M.	アメリカ	ノースイースタン大学教授	13. 5.19-13. 6. 2
LU, Jing	中国	北京大学教授	13. 9.14-15. 9.13
LAM, Yulin	シンガポール	シンガポール国立大学研究官	13. 9.25-13.10. 8
WOJCIECHOWSKI, Roman P.	ポーランド	ウッジ技術大学ポスドク	13. 9.28-14. 9.27
MEECH, Stephen Roy	イギリス	イーストアングリア大学助教授	13.10.13-13.12. 3
KONDORSKIY, Alexey	ロシア	モスクワ物理工科大学レベデフ物理研究所大学院生	13.11.15-15.11.14

PAL, Biswajit	インド	アラバマ大学博士研究員	13.11.15-15.11.14
DOPFR, Otto	ドイツ	バーゼル大学講師	13.11.24-13.12.22

5. 国際シンポジウム

BERGBREITER, David	アメリカ	テキサス A & M 大学教授	13. 9.21-13.10. 4
GAO, Jiali	アメリカ	ミネソタ大学教授	13. 9.28-13.10. 4
SUESS-FINK, GEORG	スイス	ネウチャテル大学教授	13. 9.29-13.10. 5
ZWIER, Timothy	アメリカ	バデュー大学教授	13. 9.29-13.10. 7
LI, Chao Jun	アメリカ	チューレーン大学教授	13. 9.30-13.10.13

6. 科学研究費

PETER Hann	ドイツ	マックスボーン研究所助教授	13. 5.25-13. 5.28
THOMAS La Cour Jansen	オランダ	グロニンゲン大学	13. 5.25-13. 5.27
CHA, Myoung Sik	韓国	プサン国立大学準教授	13. 6.18-13. 7. 1
KIM, Younk yoo	韓国	Hankuk 大学助教授	13. 6.25-13. 8.24 13.12.24-14. 2.21
LUPEI, Voicu	ルーマニア	原子・プラズマ国立研究所教授	13. 8.28-13. 9.30
PAVEL, Nicolaie	ルーマニア	原子・プラズマ国立研究所研究員	13. 8.28-13.11. 1
VERDAGUER, Michel	フランス	ピエール・マリー・キュリー大学教授	13. 9. 4-13. 9.11
PALACIO, Fernand	スペイン	サラゴサ大学教授	13. 9. 4-13. 9.14
BROOKS, Jim	アメリカ	フロリダ州立大学教授	13. 9. 5-13. 9.15
JUSTIN Mansell	アメリカ	Intellite 最高技術責任者	13.10.21-13.10.22
DROZDOVA, Olga	アメリカ	フロリダ大学物理学博士研究員	13.11.24-13.12. 9
MIL'NIKOV, Guennady	ロシア	ロシア科学アカデミーマクロネティクス研究所外国人特別協力研究員	13.12. 1-14. 2.28
DOMCKE, Johann Wolfgang	ドイツ	ミュンヘン工科大学物理理論化学研究所教授	13.12.12-13.12.23
BORDEN, Weston Thatcher	アメリカ	ワシントン大学化学学科教授	13.12.14-13.12.21
MANOLOPOULOS, David Eusthathios	イギリス	オックスフォード大学化学学科研究員	13.12.15-13.12.20
QUACK, Martin Paul Werner	スイス	スイス連邦工科大学物理化学研究所教授	13.12.15-13.12.21
SALAHUB, Dennis Russel	カナダ	カナダ国立研究機構ステシー分子科学研究所所長	13.12.15-13.12.21
SHAIK, Sason	イスラエル	ヘブライ大学有機化学科及び計算量子化学センター教授	13.12.15-13.12.22
BENARD, Marc Marcel Jules	フランス	国立中央科学研究所量子化学研究所上級研究員	13.12.15-13.12.23
KIM, Kwang Soo	韓国	ポハン科学技術大学化学学科教授	13.12.16-13.12.19
WU, Yundong	中国	香港科技大学化学科準教授	13.12.16-13.12.20
OLSEN, Jeppe	デンマーク	アーハス大学化学科準教授	13.12.16-13.12.21
PULAY, Peter	アメリカ	アーカンソー大学化学・生物化学科教授	13.12.16-13.12.22

7. 受託研究

BONNEAU, Richaed	アメリカ	ワシントン大学大学院生	13.10. 4-13.10.13
KIM, Chang Ho	韓国	韓国科学技術院研究員	14. 2.16-14. 2.20
LA PENNA, Giovanni	イタリア	合成・自然高分子化学物理研究所大学院生	14. 2.21-14. 3. 1
BROOKS, Charles L.	アメリカ	スクリップス研究所大学院生	14. 3. 3-14. 3.12
PETER, Wolynes	アメリカ	カリフォルニア大学教授	14. 3. 6-14. 3.11

8. 招へい協力研究員

SOLOV'EV, Evgeni A.	マケドニア	マケドニア科学技術アカデミー研究顧問	13. 4.12-13. 4.13
TOLSTIKHIN, Oleg I.	ロシア	クルシャトフ研究所研究員	13. 4.12-13. 4.13

JOUVET, Christophe.	フランス	パリ南大学教授	13. 5. 6-13. 5. 11
DEDONDER-LAUDEUX, Claude	フランス	パリ南大学教授	13. 5. 6-13. 5. 11
KJAERGAARD, Henrik G.	ニュージーランド	University of Otago 助教授	13. 5. 11-13. 5. 20
MCKOY, Vincent	アメリカ	カリフォルニア工科大学教授	13. 5. 13-13. 5. 15
LUH, Lung-Shiang	台湾	Union Chemical Laboratories Industrial Technology Research Institute Research Fellow	13. 5. 20-13. 5. 21
AHN, Kwang Hyun	韓国	Kyung Hee University 助教授	13. 6. 25-13. 6. 30
DINSE, Klaus Peter	ドイツ	Darmstadt University 教授	13. 7. 13-13. 7. 15
BHATTACHARYYA, Kankan	インド	Indian Association for the Cultivation of Science 教授	13. 7. 16-13. 7. 20
NESPUREK, Stanislav	チェコ	Institute of Macromolecular Chemistry 教授	13. 8. 4-13. 8. 10
LISY, James M.	アメリカ	イリノイ大学教授	13. 8. 4-13. 8. 6
DYKE, John M.	イギリス	サザンプトン大学教授	13. 8. 19-13. 8. 22
WOJCIK, Marek J.	ポーランド	Jagiellonian 大学教授	13. 8. 29-13. 8. 31
HOFF, Arnold J.	オランダ	ライデン大学教授	13. 11. 7-13. 11. 9
YAN, Yi Jing	中国	ホンコン科学大学准教授	14. 1. 23-14. 1. 27
莫 宇翔	中国	清華大学理学部教授	14. 1. 30-14. 3. 13
LETARD, Jeean Fransis	フランス	Institute de chemie de la Materials Bordeaux 教授	14. 2. 20-14. 2. 21
LEE, Jae- Weon	韓国	Korea Advanced Institute of Science and Technology 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 11
HAM, Sihyun	韓国	Korea University 助手	14. 3. 7-14. 3. 12
KWAC, Kijeong	韓国	Korea University 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 12
CHOI, Jun-Ho	韓国	Korea University 助手	14. 3. 7-14. 3. 12
LEE, Hyejin	韓国	korea Advanced Institute of Science and Technology 大学院生	14. 3. 7-14. 3. 11
LI, Feng-Yin	台湾	National Center for High-Performance Computing 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 12
JANG, Do Soo	韓国	Pohang University of Science and Technology 大学院生	14. 3. 7-14. 3. 12
RAJAGOPAL, G.	インド	Madras University 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 12
PEPORE, Surarit	タイ	Mahidol University 大学院生	14. 3. 7-14. 3. 12
ROBKOB, Udom	タイ	Mahidol University 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 12
THANGADURAI, Daniel	韓国	Environmental Catalysis Lab. 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 12
NEHRU, Kasi	韓国	Inha University 博士研究員	14. 3. 7-14. 3. 12
SELVARAJ, Samuel	インド	Bharathidasan University 博士研究員	14. 3. 8-14. 3. 12
SHIN, Seokmin	韓国	Seoul National University 教授	14. 3. 8-14. 3. 12
LEE, Jinhyuk	韓国	Seoul National University 博士研究員	14. 3. 8-14. 3. 12
JANG, Soonmin	韓国	Seoul National University 博士研究員	14. 3. 8-14. 3. 12
BRUDLER, Ronald	アメリカ	Scripps Research Institute 研究員	14. 3. 8-14. 3. 17

9 . 特別協力研究員

SETHIA, Ashok	インド		13. 4. 1-13. 5. 31
GRAAF, Harald	ドイツ		13. 4. 1-14. 3. 31
MORE, Sam Dylan	ドイツ		13. 4. 1-14. 3. 31
ARJANTSEV, Serguei	ロシア		13. 4. 1-14. 3. 31
HUCEK, Stanislav	チェコ		13. 4. 1-14. 3. 31
催 隆基	韓国		13. 4. 1-15. 3. 31
CHO, Sheng-Der	台湾		13. 4. 1-13. 12. 31
MIL'NIKOV, Gennady	ロシア		13. 6. 1-14. 2. 28
李 艶君	中国		13. 7. 1-14. 3. 31
MAYER, Bodo	ドイツ		13. 7. 2-13. 8. 31

10 . 海外からの訪問者

ROGER, Miller	アメリカ	ノースカロライナ大学教授	13. 4.10
SCHULZ, Claus	ドイツ	マックスボルンインスティテュート	13. 4.12-13. 4.14
JANSEN, Thomas La Cour	オランダ	グロニンゲン大学大学院生	13. 5.25-13. 5.26
HAMM, Peter	ドイツ	マックスボーン研究所助教授	13. 5.25-13. 5.28
SCOTT, Anderson	アメリカ	ユタ大学化学学科教授	13. 5.28
DANTUS, Marcos	アメリカ	ミシガン州立大学助教授	13. 6.25-13. 6.26
ASHFOLD, Michael	イギリス	ブリストル大学教授	13. 7.19-13. 7.20
ADAMOWICZ, Ludwik	アメリカ	アリゾナ大学教授	13. 9. 1-13.12.18
TAYLOR, Peter	アメリカ	カリフォルニア大学教授	13.12.16-13.12.19
YURI, Belokon	ロシア	ロシア科学アカデミー教授	14. 1.18
KOGA, Yoshitaka	カナダ	ブリティッシュ・コロンビア大学教授	14. 2. 8-14. 2. 9
CHOWDHURY, Mihir	インド	インド科学振興協会教授	13. 7.12-13. 7.13
SAMANNTA, Anunay	インド	ハイデラバード大学教授	13. 5.19-13. 5.27
BRUDKER, Ronald	ドイツ	スクリプス研究所教授	13. 5.19-13. 5.27
LIANG, Kuo-Kan	台湾	産業技術総合研究所客員研究員	13. 5.19-13. 5.27
KOSTOV, Konstantin	アメリカ	シカゴ大学研究員	13. 5.19-13. 5.27
ALBRECHT, Andreas	アメリカ	コーネル大学教授	13. 5.19-13. 5.27
ASHER, Sanford	アメリカ	ピッツバーグ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
ATKINSON, George	アメリカ	アリゾナ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
GUSTAFSON, Terry	アメリカ	オハイオ州立大学教授	13. 5.19-13. 5.27
BONN, Mischa	オランダ	ライデン化学研究所教授	13. 5.19-13. 5.27
DYER, Joanne	イギリス	ノッティンガム大学研究員	13. 5.19-13. 5.27
GEORGE, Michael	イギリス	ノッティンガム大学教授	13. 5.19-13. 5.27
GRILLS, David	イギリス	ノッティンガム大学教授	13. 5.19-13. 5.27
FIDDER, Henk	スウェーデン	ウプサラ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
LAENEN, Robert	ドイツ	ミュンヘン工科大学教授	13. 5.19-13. 5.27
GERWERT, Klause	ドイツ	ルーエ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
HAMM, Peter	ドイツ	マックス・ボルン研究所教授	13. 5.19-13. 5.27
GORDON, Keith	ニュージーランド	オタゴ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
VOS, Marten	フランス	エコール工科大学教授	13. 5.19-13. 5.27
VAROTSIS, Costas	ギリシャ	クレタ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
PHILLIPS, David	中国	香港大学教授	13. 5.19-13. 5.27
JEONG, Dae Hong	韓国	ヨンセイ大学研究員	13. 5.19-13. 5.27
KIM, Dongho	韓国	ヨンセイ大学教授	13. 5.19-13. 5.27
他 34 名			

概要

定員 (平成14年度)

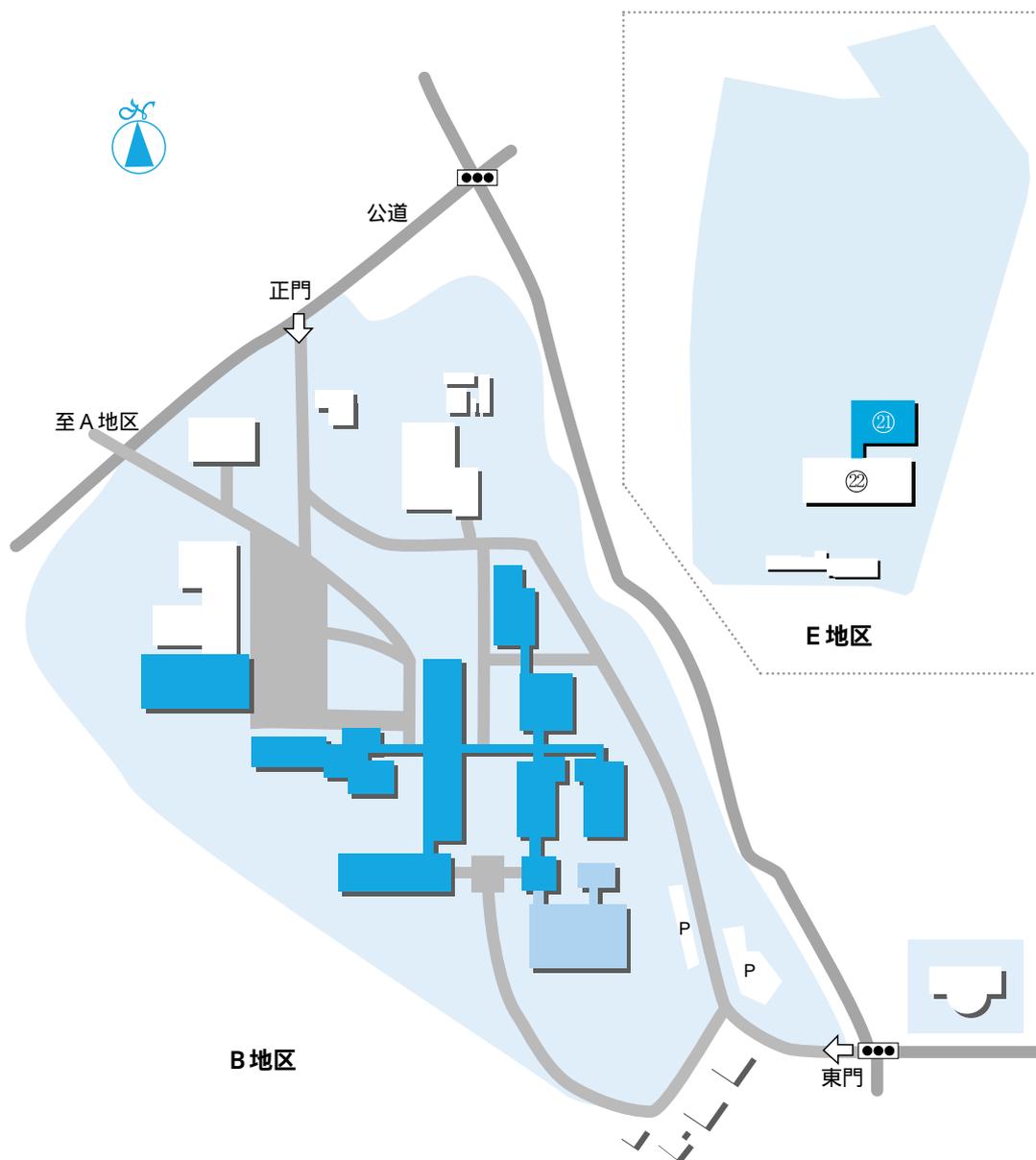
区分	所長	教授	助教授	助手	小計	技官	計
所長	1				1		1
理論研究系		3 (1)	3 (1)	7	13 (2)		13 (2)
分子構造研究系		2 (1)	2 (1)	5	9 (2)		9 (2)
電子構造研究系		2 (2)	0 (2)	6	8 (4)		8 (4)
分子集団研究系		2 (1)	1 (1)	6	9 (2)		9 (2)
相關領域研究系		1 (1)	1 (1)	3	5 (2)		5 (2)
極端紫外光科学研究系		2 (1)	2 (1)	4	8 (2)		8 (2)
研究施設		7 (2)	15 (3)	17	39 (5)		39 (5)
技術系						41	41
合計	1	19 (9)	24 (10)	48	92 (19)	41	133 (19)

()内は客員数で、外数である。

予算 (平成13年度決算額)

区分	計	人件費	物件費
分子科学研究所	2,682,019 千円	1,036,334 千円	1,645,685 千円

配置図



施設	面積 m ²	施設	面積 m ²
研究棟	2,752	図書館	2,478
実験棟	8,986	職員会館	1,598
南実験棟	3,933	エネルギーセンター	1,255
計算科学研究センター棟	2,475	廃棄物貯蔵庫	60
極低温棟	1,646	警備員室	71
化学試料棟	1,063	～ 職員宿舎	387
レーザーセンター棟	1,053	岡崎コンファレンスセンター	2,874
装置開発棟	1,259	①山手1号館	5,286
極端紫外光実験棟	3,058	②山手2号館	4,786
管理棟	2,440		

岡崎国立共同研究機構共通施設

情報図書館

情報図書館は、機構の共通施設として、3研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構の職員、共同利用研究者等の利用に供している。

主な機能

ライブラリーカードによる

24時間利用。

情報検索サービス

- ・ Web of Science
- ・ Inside web
- ・ DIALOG
- ・ NACSIS-IR
- ・ SciFinder Scholar 等



図書館建物



図書館内部

岡崎コンファレンスセンター

学術の国際的及び国内的交流を図り、機構の研究、教育の進展に資するとともに、社会との連携、交流に寄与することを目的に平成9年2月に竣工した。大会議室250名収容、中会議室150名収容、小会議室（2室）各50名収容。



岡崎コンファレンスセンター



岡崎コンファレンスセンター大会議室

共同利用研究者宿泊施設

共同利用研究者等の宿泊に供するため、3研究所及び共通研究施設の共通施設として宿泊施設「三島ロッジ」〔個室51，特別個室（1人用）9，特別個室（2人用）4，夫婦室10，家族室20〕及び「山手ロッジ」〔個室11，特別個室（2人用）4，家族室2〕があり、共同利用研究者をはじめ外国人研究員等に利用されている。



三島ロッジ



山手ロッジ

岡崎国立共同研究機構管理局

管理局	局長	森重和子
総務部	部長	砂田 進
庶務課	課長 課長補佐 庶務係長 文書広報係長 企画法規係長 情報整理係長 情報運用係長	大松山 山永本 中島田 藤山本 山古田 卓和寛 利幸敏 也雄幸浩正幸敏
人事課	課長 任用係長 給与係長 職員係長	内田芳男 小林高典 小遠藤光 廣川光之
研究協力課	課長 研究協力専門員 専門職員 専門職員 総務係長 共同研究係長 研究協力係長	林正憲 塚崎一彦 神谷良志 塚崎一彦 植松一秀 浅井誠也
国際交流課	課長 専門職員 専門職員 国際企画係長 国際交流係長	北川博 行田豊 杉浦代 伊藤鈴純 行田一豊
経理部	部長	結城義久
主計課	課長 課長補佐 総務係長 司計第一係長 司計第二係長 管財係長	平井富喜雄 横井益男 谷口哲也 田之上裕治 二村浩臣 井村美久
経理課	課長 契約専門員 経理係長 出納係長 情報処理係長 用度第一係長 用度第二係長	窪川友行 一柳垣道雄 稲市真康 市古橋悟志 伊古藤伸二 古川藤一 川田一広
建築課	課長 総務係長 建築第一係長 建築第二係長	加藤政義 市岡浩一 洪谷省一 地中剛
設備課	課長 電気係長 機械係長	藤本惠夫 井川正幸 浅野一夫

平成14年5月1日現在

交通案内

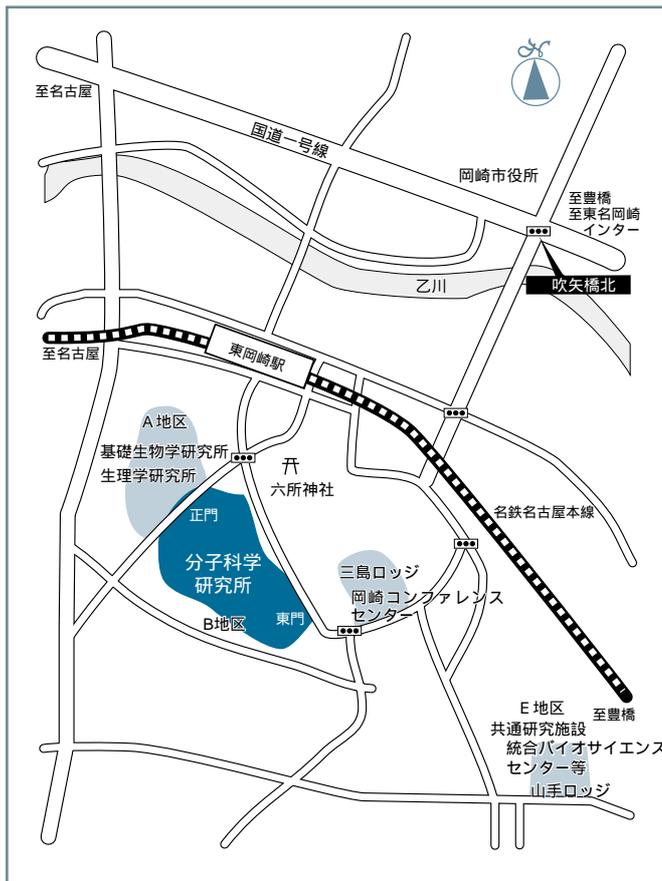
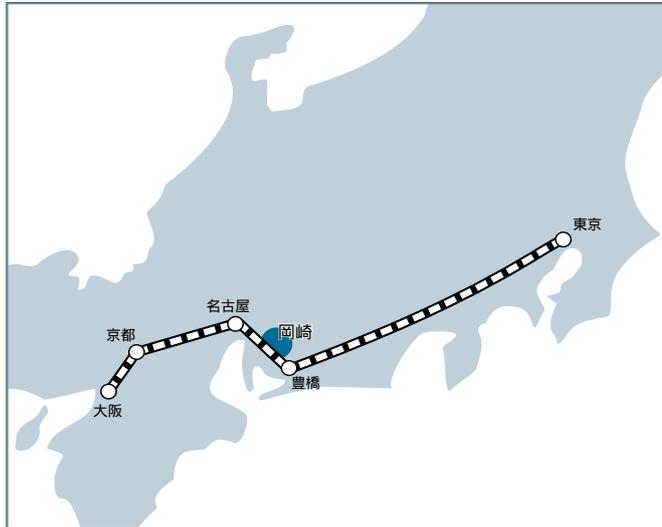
東京方面から
 豊橋駅にて名古屋鉄道（名鉄）
 に乗換え、東岡崎駅下車（豊橋 -
 東岡崎間約 20 分）。南（改札出
 て左側）に徒歩で約 7 分。

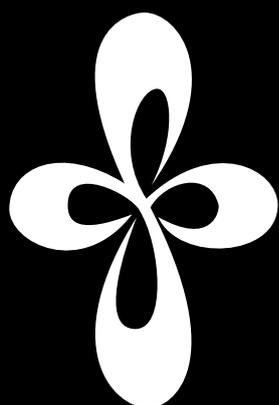
大阪方面から
 名古屋駅下車、名鉄（新名古屋駅）
 に乗換え、東岡崎駅下車（名古屋 -
 東岡崎間約 30 分）。南（改札出
 て左側）に徒歩で約 7 分。

名古屋空港から
 名鉄バス東岡崎(駅)直行便を利用。
 所用約 60 分。東岡崎駅から
 南へ徒歩で約 7 分。

自動車利用の場合

東名高速道路の岡崎 I. C.を下りて
 国道 1 号線を名古屋方面に約 1.5
 km 吹矢橋北の信号を左折。I. C.
 から約 10 分。





文部科学省 大学共同利用機関
岡崎国立共同研究機構
分子科学研究所

〒444-8585

愛知県岡崎市明大寺町西郷中38番地

TEL 0564-55-7000 (ダイヤルイン案内電話)

FAX 0564-54-2254

<http://www.ims.ac.jp/>

